

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

RAFAEL HENRIQUE OLINDO DE OLIVEIRA

ESTUDO DE MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL COM APRENDIZADO DE  
MÁQUINA NO PROJETO DA SEÇÃO DIVERGENTE DE BOCAIS DE  
MOTORES-FOGUETE

CURITIBA

2021

RAFAEL HENRIQUE OLINDO DE OLIVEIRA

ESTUDO DE MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL COM APRENDIZADO DE  
MÁQUINA NO PROJETO DA SEÇÃO DIVERGENTE DE BOCAIS DE  
MOTORES-FOGUETE

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Dr. Luciano Kiyoshi Araki

Coorientador: Dr. Nicholas Dicati Pereira da Silva

CURITIBA

2021

---

O48e

Oliveira, Rafael Henrique Olindo de  
Estudo de métodos de otimização global com aprendizado de máquina no projeto da seção divergente de bocais de motores-foguete [recurso eletrônico] / Rafael Henrique Olindo de Oliveira. – Curitiba, 2021.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, 2021.

Orientador: Luciano Kiyoshi Araki.

Coorientador: Nicholas Dicati Pereira da Silva.

1. Aprendizado do computador. 2. Motores de foguetes. 3. Processos Gaussianos.  
4. Teoria bayesiana de decisão estatística. I. Universidade Federal do Paraná.  
II. Araki, Luciano Kiyoshi. III. Silva, Nicholas Dicati Pereira da. IV. Título.

CDD: 006.31



## TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA MECÂNICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **RAFAEL HENRIQUE OLINDO DE OLIVEIRA** intitulada: **ESTUDO DE MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL COM APRENDIZADO DE MÁQUINA NO PROJETO DA SEÇÃO DIVERGENTE DE BOCAIS DE MOTORES-FOGUETE**, sob orientação do Prof. Dr. LUCIANO KIYOSHI ARAKI, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 22 de Março de 2021.

Assinatura Eletrônica  
25/03/2021 14:57:26.0  
LUCIANO KIYOSHI ARAKI  
Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica  
25/03/2021 15:55:58.0  
EDUARDO MATOS GERMER  
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO  
PARANÁ)

Assinatura Eletrônica  
25/03/2021 15:10:18.0  
ADMILSON TEIXEIRA FRANCO  
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO  
PARANÁ)

Assinatura Eletrônica  
25/03/2021 14:33:02.0  
DIEGO FERNANDO MORO  
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE POSITIVO)

## RESUMO

Problemas de otimização em engenharia podem envolver uma quantidade elevada de simulações computacionais com a superfície de resposta / função objetivo do fenômeno estudado apresentando um comportamento complexo ou com forma funcional desconhecida (caixa-preta) tal que a aplicação de métodos de otimização convexa torna-se inviável. Os métodos de otimização caixa-preta oferecem uma abordagem eficiente para a busca do maximizador global de problemas com essas características, e para isso a superfície de resposta pode ser aproximada com métodos de aprendizado de máquina. O objetivo deste trabalho foi avaliar a utilização de aprendizado de máquina e otimização global na otimização geométrica da seção divergente de tubos de motores-foguete. Simulações computacionais com os programas de CFD (SU2 e OpenFOAM) foram realizadas considerando um escoamento compressível supersônico em duas geometrias do divergente de bocais de motor-foguete, cônica e parabólica, e utilizadas no treino para o modelo. A superfície de resposta do coeficiente de empuxo em função de dois parâmetros geométricos foi ajustada com redes neurais artificiais e com processos gaussianos após a verificação do erro numérico e validação com dados experimentais do modelo invíscido, termicamente perfeito. A regressão obtida com redes neurais artificial foi utilizada junto ao algoritmo genético e a regressão por processos Gaussianos junto ao método de otimização Bayesiano. Para o problema deste trabalho em particular, o segundo método permitiu determinar os parâmetros ótimos com um menor número de simulações computacionais. Entretanto, os dois métodos foram bem-sucedidos na otimização geométrica, apresentando diferença numérica de ordem do erro estimado para a resposta. Para tuberia cônica a configuração ótima resultou num incremento percentual de 0,936 % no coeficiente de empuxo, enquanto que para a tuberia parabólica o incremento foi de 1,4503 % no coeficiente de empuxo em relação ao bocal cônico com semi-ângulo de divergente de  $15^\circ$  sob mesmas condições de operação e mesmo perfil convergente.

Palavras-chave: CFD. Aprendizado de Máquina. Motor-Foguete. Processos Gaussianos. Otimização Bayesiana.

## ABSTRACT

A plenty of optimization problems in engineering may depend on a large amount of computational simulations with high cost, or the response of some phenomenon studied may have got a complex behavior with unknown functional shape such that the application of convex optimization methods gets unfeasible. The Black-Box Optimization approach offers an efficient way to get the maximal for problems with such characteristics and for this purpose it is possible to use machine learning to build the surface response. The purpose of this work was to evaluate the usage of machine learning along with global optimization for optimizing Nozzles divergent section of Rocket engines. Computational simulations were performed for supersonic compressible flows inside of conical and parabolic Nozzles through SU2 and OpenFOAM CFD softwares. This dataset was used to train a Gaussian Process and an Artificial Neural Network so that the thrust coefficient surface in function of geometric parameters was built. The first one was used together the Bayesian Optimization Method and the second one along with the Genetic Algorithm Method. The gas model for all simulations was considered inviscid, thermally perfect after performing verification and validation for error analysis. For this problem, particularly, the Bayesian optimization was able to find the maximizers with less computational simulations than the other one. However, both methods could determine the maximizers although presenting differences of the regression errors order. As results, the thrust coefficient of the optimized conical Nozzle presented an increase of 0,936 % and the parabolic geometry had an increase of about 1,4503 % in relation to the original configuration with divergent section semi-angle of  $15^\circ$ , under the same operation conditions and equals convergent section.

Keywords: CFD. Machine Learning. Rocket Engine. Gaussian Processes.  
Bayesian Optimization.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

|   |    |
|---|----|
| FIGURA 1 – ONDAS DE EXPANSÃO E DE CHOQUE . . . . .  | 25 |
| FIGURA 2 – REGIÃO DE EXPANSÃO NO ESCOAMENTO NO BOCAL . . . . .                                  | 26 |
| FIGURA 3 – SEÇÃO DIVERGENTE CÔNICA . . . . .  | 46 |
| FIGURA 4 – PARÂMETROS GEOMÉTRICOS DO BOCAL DIVERGENTE PARABÓLICO . . . . .                      | 47 |
| FIGURA 5 – MALHA MN - PARABÓLICA. . . . .   | 48 |
| FIGURA 6 – GEOMETRIA DO BOCAL UTILIZADO NA VERIFICAÇÃO . . . . .                                | 50 |
| FIGURA 7 – MALHA 180X20 PARA A GEOMETRIA CÔNICA . . . . .                                       | 52 |
| FIGURA 8 – CUNHA DE 2,5° PARA MODELOS AXISSIMÉTRICOS NO OPEN-FOAM . . . . .                     | 52 |
| FIGURA 9 – VALORES EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS, SU2-1 . . . . .                                   | 55 |
| FIGURA 10 – VALORES EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS, SU2-2 . . . . .                                  | 55 |
| FIGURA 11 – SOLUÇÃO NUMÉRICA NA LINHA DE SIMETRIA COM OSCILAÇÃO NÃO-FÍSICA. . . . .             | 56 |
| FIGURA 12 – CAMPO DO NÚMERO DE MACH NO BOCAL. SU2-1 . . . . .                                   | 57 |
| FIGURA 13 – CAMPO DO NÚMERO DE MACH NO BOCAL. SU2-2 . . . . .                                   | 57 |
| FIGURA 14 – RESÍDUO DAS VARIÁVEIS MONITORADAS, SU2-1. . . . .                                   | 58 |
| FIGURA 15 – VALORES EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS, OF-1 . . . . .                                   | 59 |
| FIGURA 16 – VALORES EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS, OF-2 . . . . .                                   | 59 |
| FIGURA 17 – CAMPO DO NÚMERO DE MACH NO BOCAL. OF-1 . . . . .                                    | 60 |
| FIGURA 18 – CAMPO DO NÚMERO DE MACH NO BOCAL. OF-2 . . . . .                                    | 60 |
| FIGURA 19 – SOLUÇÃO NUMÉRICA NA LINHA DE SIMETRIA . . . . .                                     | 61 |
| FIGURA 20 – NORMA $L_1$ DO ERRO NA VALIDAÇÃO CRUZADA PARA A ANN . . . . .                       | 61 |
| FIGURA 21 – NORMA $L_1$ DO ERRO NA VALIDAÇÃO CRUZADA PARA O GP . . . . .                        | 62 |
| FIGURA 22 – NORMA $L_1$ DO ERRO NA VALIDAÇÃO CRUZADA PARA A GP - GEOMETRIA PARABÓLICA . . . . . | 62 |
| FIGURA 23 – COEFICIENTE DE EMPUXO - GEOMETRIA CÔNICA . . . . .                                  | 63 |
| FIGURA 24 – COEFICIENTE DE EMPUXO - GEOMETRIA PARABÓLICA . . . . .                              | 65 |

## LISTA DE TABELAS

|   |    |
|---|----|
| TABELA 1 – QUALIDADE DA MALHA . . . . .                       | 52 |
| TABELA 2 – SOLUÇÕES NUMÉRICAS COM O SU2 . . . . .             | 56 |
| TABELA 3 – TEMPO COMPUTACIONAL POR MALHA . . . . .            | 58 |
| TABELA 4 – SOLUÇÃO NUMÉRICA COM O OPENFOAM . . . . .          | 59 |
| TABELA 5 – VALIDAÇÃO CRUZADA - LOO . . . . .                  | 61 |
| TABELA 6 – MAXIMIZADORES DO EMPUXO PARA CADA MÉTODO . . . . . | 63 |
| TABELA 7 – RESULTADOS . . . . .                               | 64 |

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

|           |   |
|-----------|---|
| AG        | – <i>Algoritmos genéticos</i>   |
| ANN       | – <i>Artificial Neural Networks</i>                                     |
| Bocal C-D | – <i>Bocal Convergente-Divergente</i>                                   |
| CPU       | – <i>Central Process Unit</i>   |
| CFD       | – <i>Computational Fluid Dynamics</i>                                   |
| EGO       | – <i>Efficient Global Optimization</i>                                  |
| EI        | – <i>Expected Improvement</i>   |
| GCI       | – <i>Grid Convergence Index</i>   |
| GMSH      | – <i>Utilitário destinado à produção de malhas numéricas</i>            |
| GP        | – <i>Processo Gaussiano</i>   |
| JPL       | – <i>Jet Propulsion Laboratory</i>                                      |
| HLL       | – <i>Esquema Harten-Lax-Leer</i>  |
| HLLC      | – <i>Esquema HLL com uma onda de contato</i>                            |
| LOO       | – <i>Leave-one-out</i>  |
| LUDS      | – <i>Linear Upwinding Differencing Scheme</i>                           |
| MAE       | – <i>Mean Absolut Error</i>   |
| MUSCL     | – <i>Monotonic upstream-centered scheme for conservation laws</i>       |
| OpenFOAM  | – <i>Programa de CFD (Open source Field Operation And Manipulation)</i> |
| OB        | – <i>Otimização Bayesiana</i>   |
| PIMPLE    | – <i>Pressure based Semi Implicit Linked Equations</i>                  |
| POD       | – <i>Proper Orthogonal Decomposition</i>                                |
| QML       | – <i>Quantidade de movimento linear</i>                                 |
| RBF       | – <i>Função de Base Radial</i>  |
| RMSE      | – <i>Root Mean Square Error</i>   |

- SIMPLEC – *Semi Implicit Linked Equations*
- SU2 – *Programa de CFD de código aberto (Stanford University Unstructured)*
- SVD – *Singular Value Decomposition*
- TVD – *Total Variation Diminishing*
- TOP – *Thrust Optimized Parabola*
- VF – *Volumes Finitos*

## LISTA DE SÍMBOLOS

| Símbolo                          | – Descrição  | Unidade      |
|----------------------------------|--|--------------|
| $a_{EI}$                         | – Função de aquisição  |              |
| $a_i$                            | – Coeficientes da equação da parábola, $i \in \{0, 1, 2\}$     |              |
| $A_s$                            | – Área na seção de saída do bocal                              | $[m^2]$      |
| $A_g$                            | – Área na seção da garganta do bocal                           | $[m^2]$      |
| $\operatorname{argmax}\{\cdot\}$ | – argumento que maximiza uma função                            | .            |
| $b$                              | – Fator aditivo da rede neural artificial                      |              |
| $c$                              | – módulo da velocidade do som                                  | $[m/s]$      |
| $C_F$                            | – coeficiente de empuxo  | adimensional |
| $C_d$                            | – coeficiente de descarga                                      | adimensional |
| $C_{Back}$                       | – coeficiente de empuxo numérico para a geometria original     | adimensional |
| $C_{ideal}$                      | – coeficiente de empuxo ideal                                  | adimensional |
| $C$                              | – Centroide de um volume arbitrário numa malha não estruturada |              |
| $C_p$                            | – Calor específico à pressão constante                         | $[J/kg.K]$   |
| $C_v$                            | – Calor específico à volume constante                          | $[J/kg.K]$   |
| $C_s$                            | – Constante de segurança do GCI                                |              |
| $D$                              | – Centroide do volume à jusante de um volume C                 |              |
| $\det(A)$                        | – determinante da matriz A                                     |              |
| $E$                              | – Energia total  | $[J]$        |
| $e$                              | – Energia interna específica                                   | $[J/kg/m^3]$ |
| $\exp\{\}$                       | – função exponencial   |              |
| $\mathbb{E}(X)$                  | – Esperança da variável aleatória X                            |              |
| $\hat{E}$                        | – Estimativa do erro numérico com o método GCI                 |              |
| $F$                              | – Força de Empuxo  | $[N]$        |

|                       |  |
|-----------------------|--|
| <b>F</b>              | – Fluxo advectivo da EDP   |
| $\tilde{\mathbf{F}}$  | – Aproximação numérica do fluxo advectivo $F^a$  |
| F                     | – força de empuxo ou fluxo da forma conservativa da EDP N                                |
| $\mathbf{F}^{JK}$     | – Condição de salto entre os estados J e K para o fluxo. Com $J, K \in \{*, L, R\}$      |
| $h$                   | – parâmetro de refino da malha   |
| $\hat{H}$             | – Aproximação para a inversa da Hessiana   |
| $I$                   | – função utilidade   |
| <b>I</b>              | – Matriz identidade  |
| $J$                   | – Jacobiano da transformação de coordenadas  |
| <b>K</b>              | – Matriz de covariância  |
| $K(x, x')$            | – Função de covariância ou correlação entre $x$ e $x'$                                   |
| $L_2$                 | – Norma  |
| $L$                   | – Constante Lipschitziana  |
| $Ma$                  | – Número de Mach   |
| $\dot{m}$             | – vazão mássica kg/s   |
| $\max\{\cdot\}$       | – Máximo valor num conjunto $\cdot$  |
| $\min\{\cdot\}$       | – Mínimo valor num conjunto $\cdot$  |
| $\mathcal{N}(\mu, K)$ | – distribuição normal multivariada com vetor de médias $\mu$ e matriz de covariância $K$ |
| $NN(\cdot)$           | – Aproximação obtida pela rede neural  |
| $N_x$                 | – Número de volumes de controle na direção $x$   |
| $N_y$                 | – Número de volumes de controle na direção $y$   |
| $\mathcal{N}(i)$      | – Conjunto de volumes vizinhos ao volume $i$   |
| <b>n</b>              | – Vetor normal   |
| $\mathcal{O}(\cdot)$  | – Notação “Big-O” para a ordem assintótica   |

|               |  |            |
|---------------|--|------------|
| $P$           | – Auxiliar   |            |
| $p$           | – Pressão  | $[MPa]$    |
| $p_i$         | Pressão numa seção arbitrária  | $[Pa]$     |
| $p_0$         | – Pressão de estagnação  | $[Pa]$     |
| $p_L$         | – ordem assintótica teórica  |            |
| $p_U$         | – ordem assintótica aparente   |            |
| $p(\theta)$   | – Distribuição de probabilidade de $\theta$  |            |
| $p(f \theta)$ | – Distribuição de probabilidade condicional de $f$ dado $\theta$   |            |
| $q$           | – Fluxo de calor   | $[W/m^2]$  |
| $R$           | – Constante universal dos gases  | $[J/kg.K]$ |
| $r$           | – razão entre a diferença de fluxos em esquemas TVD  |            |
| $R_3$         | – Raio de curvatura da arco de circunferência após a seção da garganta dos bocais  |            |
| $\mathbf{R}$  | – Vetor de resíduos da integração numérica   |            |
| $\mathbf{r}$  | – vetor entre dois pontos  |            |
| $S^L$         | – Velocidade de propagação da perturbação que delimita à esquerda o domínio de influência (ou cone futuro) no campo característico |            |
| $S^R$         | – Velocidade de propagação da perturbação que delimita à direita o domínio de influência no campo característico                   |            |
| $S^*$         | – Velocidade de propagação da perturbação linearmente degenerada no campo característico intermediário                             |            |
| $\mathbf{T}$  | – Operador de rotação  |            |
| $T_0$         | – Temperatura de estagnação  | $[K]$      |
| $T$           | – Temperatura  | $[K]$      |
| $T_i$         | – Temperatura numa seção arbitrária $i$  |            |
| $TV(\cdot)$   | – função discreta da Variação Total  |            |
| $t$           | – Tempo  | $[s]$      |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| $U$                           | – Nó à montante de $C$ e colinear com $\bar{CD}$  |
| $\mathbf{U}$                  | – Vetor de variáveis conservativas  |
| $\mathbf{U}^L$                | – Variável conservativa avaliada no estado à esquerda de uma descontinuidade  |
| $\mathbf{U}^R$                | – Variável conservativa avaliada no estado à direita de uma descontinuidade   |
| $\hat{\mathbf{U}}$            | – Uma aproximação para as variáveis conservativas   |
| $u_i$                         | – componente da velocidade na direção $\nabla e_i$ ( $e_i$ vetor de uma base coordenada ou canônica de $\mathbb{R}^m$ ) |
| $V_i$                         | – Volume do $i$ -ésimo volume de controle   |
| $\mathbf{W}$                  | – Pesos da rede neural artificial   |
| $w$                           | – Componente de $\mathbf{W}$  |
| $\mathbf{W}$                  | – Tensor de parâmetros da rede neural artificial  |
| $w_{ij}^l$                    | – peso da rede neural artificial  |
| $x_i$                         | – coordenada da posição da $i$ -ésima direção coordenada ou canônica de $\mathbb{R}^m$ )                                |
| $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ | produto interno entre $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$   |
| $\otimes$                     | – Produto diádico ou tensorial  |
| $\Delta S_{ij}$               | – Área da $j$ -ésima face do $i$ -ésimo volume de controle  |
| $\partial_t$                  | – Derivada parcial em relação ao tempo  |
| $\partial_x$                  | – Derivada parcial em relação a coordenada espacial $x$   |
| $\  \cdot \ $                 | – Norma ou distância num espaço métrico   |
| $\sim$                        | – atribuição da distribuição de uma variável aleatória  |

### Símbolos gregos

|          |   |
|----------|---|
| $\alpha$ | – semi-ângulo da reta geratriz do cone do bocal cônico ou inclinação da tangente no ponto de inflexão da geometria parabólica |
| $\rho$   | – massa específica <span style="float: right;"><math>[kg/m^3]</math></span>   |
| $\gamma$ | – Constante politrópica do gás (razão entre calores específicos)  |

|               |  |             |
|---------------|--|-------------|
| $\Gamma$      | – lugar geométrico dos pontos de uma parábola  |             |
| $\epsilon$    | – razão de expansão de áreas ou raio de um intervalo na reta real                                      |             |
| $\epsilon(x)$ | – erro aleatório em $x$  |             |
| $\bar{\eta}$  | – fator multiplicativo da direção de busca do minimizador ou maximizador no algoritmo de busca linear. |             |
| $\rho_0$      | – Massa específica nas condições de estagnação   |             |
| $\rho_i$      | – massa específica numa seção arbitrária   | $[kg/m^3]$  |
| $\mu$         | – Esperança de uma variável aleatória  |             |
| $\lambda$     | – Segunda viscosidade  | $[N.s/m^2]$ |
| $\delta_{ij}$ | – Delta de Kronecker   |             |
| $\theta$      | – Variável auxiliar  |             |
| $\theta_i$    | – $i$ -ésimo parâmetro da função de covariância  |             |
| $\Omega$      | – População  |             |
| $\hat{\eta}$  | – taxa de aprendizado ou fator usado no procedimento de <i>line search</i>                             |             |
| $\zeta$       | – norma do erro do modelo preditivo  |             |
| $\kappa$      | – tensor condutividade térmica   | $[W/m.K]$   |
| $\Phi(z)$     | – distribuição cumulativa Normal de $-\infty$ a $z$  |             |
| $\phi$        | – alguma variável arbitrária   |             |
| $\psi$        | – Limitador de Fluxo do esquema TVD  |             |
| $\varphi$     | – densidade de probabilidade Normal  |             |
| $\tau$        | – máximo valor da função dentre uma sequência de avaliações  |             |
| $\Delta_i$    | – Limitador das variáveis primitivas no método MUSCL-Hancock   |             |

### Subscritos

|      |   |
|------|---|
| 0    | – Propriedade de estagnação no bocal        |
| Back | – referente ao resultado no trabalho “Back” |
| $d$  | – descarga                                  |

|            |   |
|------------|---|
| $i$        | – i-ésima coordenada                            |
| saída, $s$ | – Propriedade na saída do bocal C-D             |
| $F$        | – relativo à força de empuxo                    |
| $f$        | – Propriedade numa das faces de um volume       |
| $g$        | – Propriedade na seção da garganta do bocal C-D |
| ideal      | – referente ao escoamento ideal                 |

### **Sobrescritos**

|           |  |
|-----------|--|
| $(k)$     | – k-ésimo passo iterativo  |
| 1,2       | – Direção da componente contravariante   |
| $(l)$     | – l-ésima camada da rede neural  |
| $(L)$     | – Última camada da rede neural   |
| $(i)$     | – i-ésimo vetor de uma n-upla de vetores   |
| $L, R, *$ | – Estados à esquerda, à direita e intermediário da propagação do salto no campo característico |
| $T$       | – Operação de transposição de tensor   |
| $-1$      | – Operação de inversão de tensor   |
| $*$       | – valor obtido por regressão ou ponto no qual se determina a resposta por regressão            |

## SUMÁRIO

|            |  |           |
|------------|--|-----------|
| <b>1</b>   | <b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>  | <b>17</b> |
| <b>1.1</b> | <b>Estrutura da dissertação . . . . .</b>                            | <b>19</b> |
| <b>1.2</b> | <b>Revisão Bibliográfica . . . . .</b>                               | <b>20</b> |
| <b>1.3</b> | <b>Objetivos . . . . .</b>   | <b>23</b> |
| <b>2</b>   | <b>FUNDAMENTOS . . . . .</b>   | <b>24</b> |
| <b>2.1</b> | <b>Bocais convergente-divergente . . . . .</b>                       | <b>24</b> |
| 2.1.1      | Escoamento Isentrópico . . . . .                                     | 26        |
| 2.1.2      | Parâmetros de interesse . . . . .                                    | 27        |
| <b>2.2</b> | <b>Modelo Matemático e métodos numéricos . . . . .</b>               | <b>28</b> |
| 2.2.1      | Equações de Euler . . . . .  | 28        |
| 2.2.2      | Métodos Numéricos para leis de conservação . . . . .                 | 30        |
| <b>2.3</b> | <b>Programas de código aberto para CFD . . . . .</b>                 | <b>34</b> |
| 2.3.1      | SU2 . . . . .  | 34        |
| 2.3.2      | OpenFOAM . . . . .   | 35        |
| 2.3.3      | Malhas e o utilitário GMSH . . . . .                                 | 36        |
| <b>2.4</b> | <b>Verificação e Validação em CFD . . . . .</b>                      | <b>38</b> |
| <b>2.5</b> | <b>Aprendizado de Máquina . . . . .</b>                              | <b>39</b> |
| 2.5.1      | A rede neural Multilayer Perceptron . . . . .                        | 39        |
| 2.5.2      | O Processo Gaussiano . . . . .                                       | 41        |
| 2.5.3      | Validação de modelos por aprendizado de máquina . . . . .            | 42        |
| <b>2.6</b> | <b>Métodos de Otimização . . . . .</b>                               | <b>43</b> |
| 2.6.1      | Algoritmos Genéticos . . . . .                                       | 43        |
| 2.6.2      | Otimização Bayesiana com Processo Gaussiano . . . . .                | 44        |
| <b>3</b>   | <b>METODOLOGIA . . . . .</b>   | <b>46</b> |
| <b>3.1</b> | <b>Modelos termofísicos, de transporte e geometrias dos bocais .</b> | <b>46</b> |
| <b>3.2</b> | <b>Condições de Contorno . . . . .</b>                               | <b>48</b> |
| <b>3.3</b> | <b>Verificação e Validação . . . . .</b>                             | <b>50</b> |
| <b>3.4</b> | <b>Otimização . . . . .</b>  | <b>53</b> |
| <b>4</b>   | <b>RESULTADOS . . . . .</b>  | <b>55</b> |
| <b>4.1</b> | <b>Verificação e Validação . . . . .</b>                             | <b>55</b> |
| 4.1.1      | SU2 . . . . .  | 55        |
| 4.1.2      | OpenFOAM . . . . .   | 59        |
| <b>4.2</b> | <b>Otimização dos perfis . . . . .</b>                               | <b>61</b> |
| <b>5</b>   | <b>CONCLUSÃO . . . . .</b>   | <b>66</b> |

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 5.1 | Constatações gerais . . . . .            | 66 |
| 5.2 | Sugestões de Trabalhos Futuros . . . . . | 67 |
|     | REFERÊNCIAS . . . . .                    | 68 |

## 1 INTRODUÇÃO

Os bocais Convergentes-Divergentes (CD) são constituintes fundamentais dos sistemas de propulsão de mísseis balísticos e foguetes, cuja função é a de converter energia de pressão dos gases de combustão em energia cinética que ao serem ejetados resultam na força de reação capaz de controlar a dinâmica do corpo propulsionado.

Essa força de reação denominada empuxo é um parâmetro a ser maximizado no projeto ótimo de tubeiras, de modo a se extrair o máximo de energia útil do combustível o qual compreende elevado percentual da massa de foguetes, significando também maior autonomia. A máxima conversão depende da geometria do bocal e diversos estudos foram propostos para o projeto de sua forma.

O custo e a dificuldade de experimentação neste campo não são pequenos, o que suscita a utilização de simulação computacional por meio de FEA e CFD. Neste trabalho não será considerado o projeto estrutural, limitando a uma análise por CFD. O processo de obtenção da solução numérica por CFD compreende a discretização do modelo físico validado, seleção do sistema de coordenadas e da malha do componente, escolha dos métodos de interpolação dos fluxos dos termos do modelo discretizado, seleção do método de solução dos sistemas lineares e do critério de convergência (2).

Com a utilização de métodos numéricos pode-se incorrer em erros como de iteração, discretização e truncamento, e para a avaliação tanto da confiabilidade da implementação quanto da ordem de convergência, ou estimativa de erros, métodos de verificação são utilizados, conduzindo à soluções confiáveis para o emprego a que se destina. Enquanto a verificação tem por objetivo atestar a qualidade da solução numérica, o grau de concordância do modelo numérico com a física do problema é objeto da validação, para tal compara-se a solução numérica do modelo com dados experimentais (3).

Dados experimentais de tubeiras são raros, sendo os dados disponibilizados graficamente em (4) um dos poucos acessíveis na literatura. Neste trabalho, de cunho experimental realizado no laboratório de propulsão a jato da Caltech (JPL) em parceria com a NASA, apresentou-se um estudo do efeito de parâmetros geométricos do convergente e do divergente, aferindo medições do campo de pressão na parede da estrutura. Com isso curvas do empuxo adimensionalizado e do coeficiente de descarga foram descritas para diferentes configurações geométricas, perfazendo indiretamente um estudo de otimização experimental.

No âmbito numérico, os métodos de otimização podem ser diretos, dependentes ou não de aproximações para os gradientes, ou indiretos, como os métodos adjuntos e o método variacional aplicado por Rao em (1). Embora o método variacional permita a busca por máximos globais sem restrições, a maior desvantagem ao utilizá-los reside no

fato de que em se alterando as configurações ou a dinâmica dos gases deve-se refazer o trabalho computacional do início, dependendo mais tempo em simulação (5). Apesar desta assertiva constar num trabalho datado de 1981, ainda se mostra recente, pois constitui um elemento de elevação de custo em projetos de engenharia.

Com a crescente competição entre empresas do setor aeroespacial privadas, oferecendo serviços e soluções em viagens espaciais, o tempo de projeto ganha maior peso considerando as vantagens do pioneirismo tecnológico nesta área. Com isso, metodologias de projetos com menor custo<sup>1</sup>, maior eficiência computacional e confiáveis são desejáveis e constituem recentes tópicos de estudos. Em especial, o uso de métodos de aprendizado de máquina e métodos de otimização para funções caixa-preta possuem características interessantes neste sentido. Os métodos de aprendizado de máquina podem ser empregados em dois principais contextos objetivando eficiência computacional: redução de dimensionalidade dos modelos numéricos e para a obtenção de modelos black-box.

Conhecidos como ROM (*Reduced Order models*), utilizam aprendizado de máquina na redução de dimensionalidade de dados e simulações. Podem ser implementados de forma direta, empregando SVD ou POD em um conjunto de soluções espaciais e temporais do FOM (*Full Order Model*) ou de forma indireta, quando o sistema de equações é fatorado por SVD, e resolve-se o sistema para os valores singulares de maior peso. Desse modo, o FOM é reduzido a um sistema de equações algébricas subdeterminado. Este método ainda possui desafios de convergência quando a equação diferencial é não-linear.

Os modelos *black-box* são aproximações independentes de forma funcional e podem ser *Data-Driven* quando construídos com um conjunto de dados de observações do fenômeno, *Physics-based* quando são baseados em modelos física ou híbridos. No primeiro caso, o modelo é construído com dados experimentais ou de simulação. O ajuste da curva é realizado com a otimização dos seus parâmetros (denominados hiper-parâmetros) buscando minimizar os erros da sua resposta com a resposta esperada em um conjunto de dados de validação. Uma vantagem dos métodos de aprendizado de máquina *black-box* é permitir a construção da aproximação sem assunções da forma funcional, oferecendo maior flexibilidade na captura da complexidade do fenômeno. No entanto, muitas vezes seus hiper-parâmetros não fornecem uma interpretação relacionada ao mesmo.

Na tarefa de determinação das condições ótimas, Otimização Bayesiana (OB) e algoritmos genéticos (AG) são métodos apropriados para funções *black-box*, permitindo se proceder com a busca pelo maximizador global sem o conhecimento da forma analítica da função objetivo. Podem ser implementados como um projeto sequencial de otimização (ou SMBO, *Sequential Model Based Optimization*) em que cada reamostragem é feita

<sup>1</sup> O termo custoso é atribuído àquilo que pode consumir uma grande quantidade de recurso computacional, financeiro ou tempo de processamento. Desse modo, simulações computacionais em CFD podem ser consideradas custosas a depender da sua complexidade, onde o menor número de avaliações de uma função objetivo dependente de simulações é algo desejável.

de modo a se maximizar a informação sobre a resposta com um menor número de experimentos (7). Para isso, constrói-se um modelo substituto (*surrogate*) com base em dados de experimentação ou simulação para predição do comportamento da variável resposta. Uma diferença para o método de superfície de resposta clássico reside em se utilizar um algoritmo que alterna entre realizar uma amostragem focada em minimização ou maximização da função objetivo e em se realizar uma amostragem em regiões onde o erro de predição pode ser elevado, diminuindo a incerteza do mesmo (8). São preferencialmente empregados quando a função algébrica a ser otimizada possui elevado custo para ser avaliada ou é desconhecida.

Portanto, destaca-se a importância do estudo do assunto, em particular o seu potencial como ferramenta de otimização em engenharia, oferecendo formas mais eficientes de otimização.

## 1.1 Estrutura da dissertação

Este trabalho é estruturado em introdução, fundamentos, metodologia e os resultados. Na introdução busca-se situar o leitor das motivações que conduziram este trabalho a ser realizado, bem como uma revisão bibliográfica que não se limita ao aprendizado de máquina como ferramenta de modelagem, foco deste trabalho, mas também com o objetivo de apresentar trabalhos que se mostram uma tendência no desenvolvimento da dinâmica dos fluidos computacional e aprendizado de máquina, quer seja como ferramenta de estudo fenomenológico, de redução de dimensionalidade ou de aplicações em projetos.

No capítulo sobre fundamentos buscou-se apresentar os princípios teóricos de simulação computacional com softwares de código aberto, os princípios físicos da modelagem da dinâmica dos gases (fluidos compressíveis), os fundamentos do aprendizado de máquina e dos métodos de otimização utilizados no trabalho. Na seção de simulação computacional é apresentada uma breve explicação dos métodos numéricos utilizados nas implementações SU2 e OpenFOAM, especificamente os métodos de alta ordem e apropriados para captura de gradientes elevados que podem ocorrer nos escoamentos compressíveis. A compreensão desses métodos numéricos se tornam importantes para a correta configuração dos softwares;

Na seção sobre aprendizado de máquina são apresentados os métodos de validação dos modelos, os conceitos teóricos dos métodos propriamente, e os algoritmos de otimização utilizados no ajuste dos modelos aos dados. Decidiu-se mantê-los nesta seção pois são parte do algoritmo de aprendizado de máquina, especificamente do treino do modelo (quando os hiper-parâmetros do modelo são ajustados para minimizar o erro e manter a sua capacidade de generalização, isto é, retornar respostas com erro tolerável em condições para as quais não fora treinado).

No capítulo sobre a metodologia são apresentadas as geometrias utilizadas com

todas as suas especificações (cônica e parabólica), malhas, configurações dos softwares e algoritmos. E por fim, os resultados obtidos e uma discussão que buscou elucidar os principais aspectos deste trabalho em relação aos trabalhos sobre otimização de divergentes usados como referência para este trabalho.

Na seção a seguir serão apresentados os principais trabalhos em otimização de bocais, bem como trabalhos referentes às metodologias de aprendizado de máquina para redução de dimensionalidade, para modelagem física e otimização.

## 1.2 Revisão Bibliográfica

Como uma reformulação do trabalho de Guderley e Hantsh em (9), Rao em (1) utilizou o método das características e cálculo variacional na otimização do perfil do divergente. Tomando-se uma linha característica com  $Mach > 1$  através do raio de curvatura da garganta a ser utilizada como condição inicial no método das características, e com as condições de compatibilidade da direção do escoamento e o número de Mach ao longo de curvas características construiu a primeira variação do funcional a ser maximizado. O problema estava sujeito a restrições de comprimento constante bem como o escoamento na saída satisfazendo o fluxo na garganta (continuidade). O escoamento é considerado isentrópico. Entretanto, para razões de expansão elevadas o método produz perfis muito longos, cujo peso pode inviabilizar ou degenerar sua eficiência em aplicações reais.

Rao em (10) desenvolveu o perfil sino com o objetivo de obter bocais mais curtos, aproximando-o por uma parábola com empuxo igual ao de uma cônica de semi-ângulo de  $15^\circ$  e 80 % do seu comprimento. Para se construir a parábola, quatro parâmetros são necessários, a saber, o ângulo do ponto de tangência do perfil com o arco da garganta, o ângulo de saída, o comprimento da seção divergente e a razão de expansão. Para um dado comprimento, os ângulos são obtidos para o empuxo máximo. Estes bocais são denominados TOP (*Thrust Optimized Parabola*).

Hoffman em (5) estudou o uso de métodos diretos na otimização de perfis parabólicos obtendo configurações iguais aquelas obtidas quando da utilização de cálculo variacional na otimização. Foram utilizados três métodos de otimização não-linear: Busca por linha multidimensional, Newton e gradiente descendente; foram determinados o ângulo de tangência da seção divergente e o raio de saída do bocal maximizadores do empuxo para um escoamento isentrópico de um gás perfeito. A diferença de 0,21% para a condição de vácuo e de 0,66% ao considerar uma pressão ambiente entre o empuxo obtido e o empuxo do trabalho de Rao em (10) foram atribuídas a erros de iteração do processo de otimização e ao programa usado.

Frey et al. em (11) propõe uma construção segmentada do perfil objetivando mitigar a irreversibilidade causada por choque oblíquo e separação da camada limite (*free*

*shock separation* e *restricted shock separation*). Da garganta até o ponto de inflexão o perfil é construído pelo método de contorno ideal truncado (TIC), uma vez que essa região é a responsável pela formação de choque no interior do bocal. A partir do ponto de inflexão constrói-se um perfil parabólico TOP. Ressalta-se que o perfil não necessariamente produz um escoamento livre de choque.

Moro em (12) realizou a análise e otimização de diversos perfis da seção divergente. Perfil logarítmico, cossenoidal, senoidal, parabólico e cônico. As soluções foram obtidas com o código Mach2D e considerou-se um fluido invíscido e termicamente perfeito. Foram levantadas curvas de empuxo analisando-se o efeito da razão de expansão fixa e variável, comparando-os com o escoamento no modelo unidimensional. Para a comparação em que o raio de saída da tubeira era variável com comprimento fixo foi utilizada uma malha de 384x160, e de até 1472x640 para raio de saída e comprimento constantes. Constatou que para cada comprimento de tubeira, existe uma razão de expansão que gera o maior empuxo possível, e que o ângulo da inclinação do divergente que gera esta razão de expansão não se altera com o aumento no comprimento da tubeira. Para o bocal cônico obteve inclinação de 20° como a configuração maximizadora do coeficiente de empuxo.

Radtke em (13) utilizou a metodologia de superfície de resposta para a obtenção das curvas de empuxo no vácuo de perfis cônicos, parabólicos e sino, a serem otimizados pelo método de evolução diferencial. Foram analisadas a influencia da pressão e da temperatura de estagnação na câmara de combustão, ou *plenum*, a influencia da hipótese de fluido caloricamente perfeito, com ou sem viscosidade, mono ou multi-espécie na determinação de cada perfil ótimo para as geometrias consideradas no trabalho. Constatou-se pelo DOE que a geometria ótima é influenciada pela temperatura do gás e pelo raio da garganta. Para o bocal de geometria cônica otimizado obteve uma melhoria no coeficiente de empuxo de até 2,46% ao coeficiente de empuxo de tubeiras cônicas com inclinação do divergente de 15° e de igual comprimento.

Germer em (14) analisou os parâmetros geométricos da seção convergente na otimização do empuxo. Considerando tubeiras com pequena razão de raio (0,625), obteve-se uma aumento de até 0,6 % do que aquele obtido com a configuração do bocal em (4). Avaliou também o efeito da inclinação e do raio de curvatura no convergente.

Outro estudo fenomenológico de escoamentos no interior de tubeiras é apresentado em (15). Com o código Mach2D foram realizados estudos de verificação sobre modelos reativos congelado e equilíbrio local. É também apresentada a validação do modelo invíscido com gás perfeito e propriedades constantes, com grande concordância com os resultados experimentais de Back em (4).

Além do uso de CFD em estudos fenomenológicos ou de otimização, o aprendizado de máquina se mostra uma opção promissora, sobretudo como uma ferramenta

complementar aos métodos numéricos de CFD nesses campos de pesquisa. A pesquisa em CFD com aprendizado de máquina com o uso de dados de velocimetria por imagens de partículas data do início da década de 90 (16). Entretanto, um uso de redes neurais profundas em problemas de fluidos só surgiu em 2002, com o estudo da estrutura de escoamentos com camada limite turbulenta (17). O fato de escoamentos turbulentos serem ainda pouco compreendidos conduziu ao uso de aprendizagem de máquina no seu estudo fenomenológico.

Redes neurais têm ganhado espaço na investigação de estruturas coerentes, ante os métodos de análise modal como *proper orthogonal decomposition* e decomposição em valores singulares em decomposição de modos de escoamentos complexos. Com os métodos de decomposição em componentes principais pode-se determinar variáveis latentes (não observáveis) através dos dados. Método originalmente desenvolvido para uso em visão computacional, a extração de características latentes por convolução de filtros apresentada por LeCun em (18) foi empregada em análise modal de fluidos em (19). Neste trabalho utilizou-se um problema teste de escoamento no entorno de um cilindro para se avaliar o uso de camadas de convolução em decomposição não-linear dos modos do escoamento.

Aplicações em engenharia também vem ganhando espaço. Em (20) aplicou-se a arquitetura recorrente bidirecional para estudar a evolução temporal do fluxo de ar de injeção no interior de um cilindro de um motor de combustão interna. Os dados foram obtidos por técnicas de velocimetria por imagens de partículas.

Em (21) uma rede neural foi aplicada para otimização de trocadores de calor cujo tubo é munido de um inserto de fios helicoidais aderente a sua parede interna. No processo de otimização a função obtida pela rede neural é utilizada com o algoritmo genético de modo a se otimizar a geometria do inserto, considerando como função objetivo a eficiência termodinâmica do trocador. Os dados de treinamento da rede neural foram obtidos por simulação computacional do escoamento em regime permanente, obtendo-se uma relação da eficiência em função do Reynolds do escoamento, do passo helicoidal e do diâmetro do fio. Utilizou-se uma arquitetura *multilayer perceptron* treinada com esses dados, permitindo-se determinar a configuração ótima para cada Reynolds característico do escoamento.

Em (22) foi avaliada a influência de fatores aerodinâmicos e geométricos no coeficiente de arrasto do escoamento externo na região adaptável do bocal de aviões de combate (*afterburner*). Apresentou-se uma comparação entre o método de otimização Bayesiana com processo estocástico Gaussiano e com as redes neurais artificiais *multilayer perceptron*, reportando uma menor norma do erro de regressão com a utilização de deste último método.

### 1.3 Objetivos

O objetivo geral deste trabalho é apresentar uma metodologia voltada à otimização geométrica de bocais de motores-foguete integrando métodos de aprendizado de máquina, simulação computacional e métodos de otimização eficiente. Dois modelos *black-box* do empuxo do bocal em função de parâmetros geométricos são construídos, uma rede neural artificial de topologia densa e um processo gaussiano que são treinados com dados de simulação computacional de CFD e utilizados nos métodos de otimização apropriados para modelos *black-box*: Otimização Bayesiana e algoritmos genéticos. Com isso o objetivo específico deste trabalho é verificar a eficiência computacional desses métodos na otimização de uma geometria cônica e parabólica para malhas não muito refinadas. Para isso foram analisados os seguintes critérios:

- Análise do erro dos coeficientes de empuxo máximos obtidos para as geometrias consideradas em relação aos valores da literatura;
- comparação entre os empuxos para as configurações maximizadoras obtidas com os dois métodos para a geometria cônica e em relação ao coeficiente de empuxo ideal; e
- comparação entre o incremento no coeficiente de empuxo da geometria parabólica otimizada em relação à geometria cônica otimizada e em relação ao ideal.

Para esses objetivos serem realizados o trabalho foi organizado nas seguintes etapas, a serem detalhadas na seção destinada à metodologia:

- Verificação e validação do modelo para escoamento invíscido compressível com os *softwares* SU2 e OpenFOAM, e seleção de um dos *softwares* para a execução do trabalho;
- produção de malhas para as geometrias de estudo com o utilitário GMSH;
- implementação de redes neurais artificiais e do processo Gaussiano e comparação entre a norma do erro utilizando validação cruzada (*Leave-one-Out*) e verificação da normalidade do erro;
- implementação e aplicação de redes neurais artificiais com o método de otimização por Algoritmos Genéticos na otimização da geometria cônica;
- implementação e aplicação do processo Gaussiano com Otimização Bayesiana na otimização da geometria cônica; e
- implementação e aplicação de Otimização Bayesiana com o processo Gaussiano na otimização da geometria parabólica;

## 2 FUNDAMENTOS

Nesta seção são apresentados os fundamentos teóricos dos três principais tópicos deste trabalho. Inicialmente, é apresentada a física da dinâmica de gases em bocais, considerando as peculiaridades de um fluido compressível. Esta seção é requisito para a compreensão da modelagem matemática do fenômeno e de suas limitações. A seção subsequente trata dos métodos numéricos empregados em CFD, com atenção especial àqueles amplamente utilizados para se resolver escoamentos de fluidos compressíveis. Este domínio é de grande utilidade para a adequada utilização dos softwares de código aberto para CFD empregados neste trabalho e que são o tema da seção seguinte, onde busca-se elencar os principais aspectos das implementações OpenFOAM e SU2, bem como o utilitário para geração de malhas GMSH. Na sequência são apresentados os métodos de verificação e validação em CFD, importantes para se estimar o nível de erro a que uma solução numérica está incorrendo. A penúltima seção é destinada à teoria de Processos Gaussianos e redes neurais artificiais, de validação dos modelos e dos algoritmos de otimização empregados, oferecendo um conteúdo básico que é requisito para implementações em Python. A última seção se destina aos métodos de otimização para funções *black-box*, quando a forma funcional é desconhecida e, portanto, a aproximação de gradientes para a superfície de resposta é fator impeditivo para se utilizar métodos de otimização baseados em gradiente.

### 2.1 Bocais convergente-divergente

Em sistemas de propulsão, a geometria do bocal convergente-divergente é desenvolvida para converter o máximo de entalpia (energia de pressão e energia interna) em energia cinética, de modo a ter-se o máximo desempenho de empuxo. Dependendo da região do bocal, o escoamento pode ser subsônico, sônico ou supersônico, sendo o caso supersônico na seção divergente o de maior interesse em condições de operação de motores-foguete uma vez que os efeitos de compressibilidade do fluido (em regime supersônico) permitem a ocorrência de expansão com aumento de velocidade (23). Com o propósito de compreender o escoamento no seu interior, os bocais são divididos em três regiões: subsônica, transônica e supersônica.

Na região convergente, o produto das reações químicas da câmara de combustão (*plenum*) são acelerados de velocidades subsônicas e seu escoamento é relaminarizado (14). A geometria desta seção, bem como as condições termodinâmicas do fluido no *plenum*, tem influência na vazão mássica do bocal.

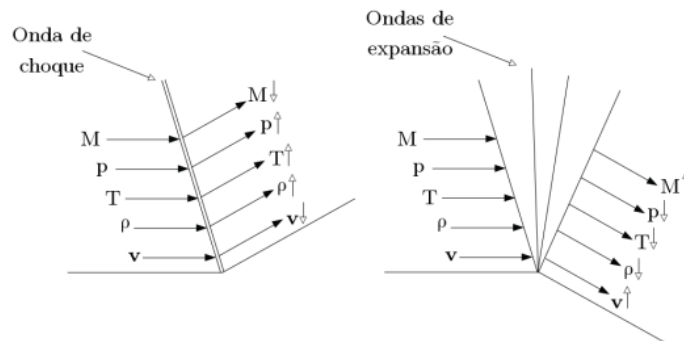
A máxima vazão é obtida quando a pressão na seção da garganta alcança a pressão crítica, isto é, quando o bocal encontra-se bloqueado, e qualquer elevação de pressão não resultará em aumento de vazão.

Na região transônica ocorre a transição do regime subsônico para o supersônico. O raio de curvatura da garganta modifica a quantidade de movimento do escoamento, bem como a sua vazão mássica, que aumenta com o aumento deste parâmetro. Com isso, no escoamento à jusante da garganta são observados fenômenos de compressão e expansão.

As propriedades do fluido numa região de expansão variam de modo suave, ocorrendo aumento do número de Mach e diminuição das demais propriedades termodinâmicas (24). Ainda, no escoamento supersônico, a ocorrência de ondas de choque surgem quando do “congestionamento” do escoamento do fluido. Através de um choque ocorre a redução do Mach, aumento de pressão, massa específica e temperatura (24). Este fenômeno gera uma perturbação no meio que se propaga pela frente de choque na velocidade do som, e cujas propriedades apresentam descontinuidade.

Na FIGURA 1, a descontinuidade da superfície altera o escoamento, com a formação da onda de compressão. Este exemplo simples demonstra conceitualmente a necessidade de se ter derivadas suaves das geometrias dos bocais com o objetivo de se evitar a formação de choque, uma vez que é uma fonte de irreversibilidade no escoamento (26).

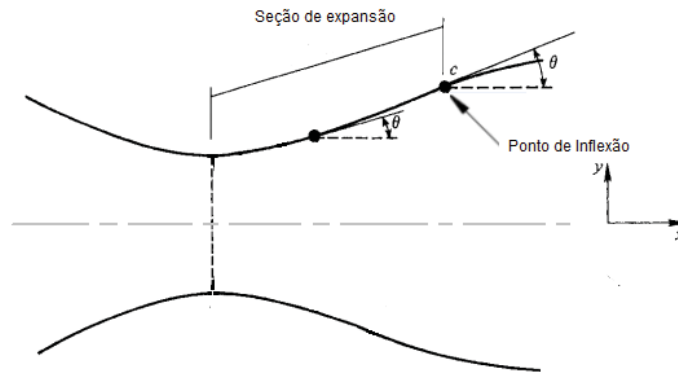
FIGURA 1 – ONDAS DE EXPANSÃO E DE CHOQUE



FONTE: Imagem extraída de (25)

As leis da ondulatória clássica são observadas no interior de bocais, onde ocorrem interações entre ondas mecânicas. Da seção da garganta até o ponto de inflexão (2), denominada região de expansão, ondas de expansão são formadas (24). Na FIGURA 2, há representações das primeiras derivadas da geometria antes e após o ponto de inflexão.

FIGURA 2 – REGIÃO DE EXPANSÃO NO ESCOAMENTO NO BOCAL



FONTE: Adaptado de (24).

### 2.1.1 Escoamento Isentrópico

O escoamento é considerado ideal quando é quase-unidimensional e expande-se de forma adiabática e reversível. Nesse caso, são assumidas as seguintes condições (27):

- os gases de combustão compõe uma mistura homogênea e invariante no tempo;
- os gases de combustão são ideais;
- escoamento é invíscido e adiabático;
- escoamento está em regime permanente e com propriedades constantes;
- a composição química é mantida constante após a câmara de combustão;
- na seção de saída o escoamento é puramente axial;
- propriedades são uniformes em qualquer seção transversal do bocal;
- só há espécies gasosas no escoamento e a mistura é homogênea; e
- forças de corpo são desprezíveis.

Nessas condições, as propriedades de estagnação são dadas por:

$$\frac{T_0}{T_i} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma^2 \quad (2.1)$$

$$\frac{p_0}{p_i} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (2.2)$$

$$\frac{\rho_0}{\rho_i} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma^2\right)^{\frac{1}{\gamma - 1}} \quad (2.3)$$

O índice 0 representa a propriedade de estagnação e o índice  $i$  denota a propriedade em alguma seção arbitrária.  $Ma$  é o número Mach do escoamento na seção, expresso por  $Ma = u/\sqrt{\gamma RT}$ . Nestas condições, obtém-se uma expressão para a determinação do número de Mach em qualquer seção (27),

$$Ma_i = \frac{Ma_j A_j}{A_i} \sqrt{\left(\frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_i}{1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_j}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}}. \quad (2.4)$$

Conhecendo-se as outras variáveis, esta equação é resolvida para  $Ma_i$  tomando-se a iteração de ponto fixo  $Ma_i^k = f(Ma_i^{k-1})$ , com  $f$  sendo o lado direito da eq. 2.4 e  $Ma_i^k$  obtido com um método de busca linear, como um método Newton ou quase-Newton.

### 2.1.2 Parâmetros de interesse

Serão apresentados nesta seção parâmetros geométricos e de desempenho de motores-foguete, que são de interesse na otimização dos bocais.

- **Razão de expansão**

É definida como a razão entre a área de saída,  $A_s$ , e a área de garganta,  $A_g$ , do Bocal C-D,

$$\epsilon = \frac{A_s}{A_g}. \quad (2.5)$$

- **Força de Empuxo**

É a força atuante no foguete promovida pelo seu sistema de propulsão,

$$F = \int_{A_s} (\rho u u + p) dA, \quad (2.6)$$

onde  $\int_{A_s} \rho u u dA$  é a força associada ao quantidade de movimento dos gases ejetados e  $\int_{A_s} p dA$  a força associada à diferença de pressão estática dos gases nas fronteiras do bocal.

- **Coefficiente de Empuxo**

É um valor adimensional definido como o quociente entre a força total  $F$  e a força na seção da garganta. É um parâmetro global de eficiência de um motor-foguete, sendo calculado como

$$C_F = \frac{F}{p_g A_g}. \quad (2.7)$$

Para o escoamento ideal, tem-se a seguinte expressão

$$C_{\text{ideal}} = \gamma \frac{\gamma + 1}{2}^{-\frac{\gamma}{\gamma-1}} \sqrt{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}}. \quad (2.8)$$

- **Vazão Mássica - Descarga**

É a massa de gás que passa pela fronteira (entrada ou saída) do bocal em um instante de tempo, calculada por

$$\dot{m} = \int \rho u dA. \quad (2.9)$$

- **Coefficiente de Descarga** É calculado com a razão entre a descarga numérica e a descarga ideal para as mesmas condições

$$C_d = \frac{\dot{m}}{\dot{m}_{ideal}}. \quad (2.10)$$

Com  $\dot{m}_{ideal}$  sendo a vazão mássica da solução unidimensional isentrópica.

## 2.2 Modelo Matemático e métodos numéricos

Nesta seção serão discorridas as hipóteses que conduzem ao uso das equações de Euler, considerações sobre o modelo termofísico e sobre os conceitos de FVM utilizados na resolução numérica pelo código SU2 bem como pelo OpenFOAM, não esgotando os seus recursos numéricos disponíveis. Apresenta-se uma breve revisão dos esquemas advectivos para leis de conservação hiperbólicas, presentes no SU2 e amplamente empregados para a captura de soluções não suaves, como aquelas associadas aos fenômenos que podem incorrer em escoamentos compressíveis e, por fim, os critérios de qualificação de malhas obtidas com o utilitário GMSH.

### 2.2.1 Equações de Euler

As equações que governam o comportamento dos fluidos são oriundas do balanço de transporte de quantidade de movimento, de massa e transporte de energia (28). O balanço da massa, ou equação da continuidade, é dado por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.11)$$

O transporte de quantidade de movimento ocorre pela força viscosa (tensão cisalhante), pela pressão hidrostática (tensão normal), na face de um elemento de fluido, e por transporte advectivo. A tensão viscosa  $\tau_{ij}$  é descrita por um tensor de segunda ordem e a sua equação constitutiva depende do fluido (29). Considerando-se fluido invíscido (equação de Euler), as irreversibilidades associadas a tensão viscosa são desconsideradas, resultando-se na lei de conservação hiperbólica da quantidade de movimento linear, dada por

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_k}{\partial x_k} - \delta_{ik} \frac{\partial p}{\partial x_k} = 0. \quad (2.12)$$

No caso do transporte de energia, este é entendido como um efeito da condução térmica, ou transferência de energia entre átomos ou moléculas vizinhos por difusão, do transporte por advecção de energia cinética e energia interna e do trabalho nas faces do elemento de fluido pelas tensões do meio. A intensidade da difusão térmica é expressa pelo tensor difusividade térmica  $\kappa_{ik}$  modelada com as lei de Fourier, cuja contribuição no balanço é desconsiderada no escoamento invíscido (28). Desse modo, tem-se o balanço dado por

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k E}{\partial x_k} - \delta_{ik} \frac{\partial p}{\partial x_k} = 0, \quad (2.13)$$

onde  $E = \rho \delta_{ij} u_i u_j + \rho e$  é a energia total ou entalpia do elemento de fluido.  $e$  é a energia específica interna. Desse modo, as equações (2.11), (2.12) e (2.13) em notação indicial podem ser reescritas como

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = 0. \quad (2.14)$$

Com  $\mathbf{U} = [\rho \quad \rho \mathbf{u} \quad \rho E]^T$  o vetor de variáveis conservativas e  $F$  o fluxo advectivo dado por

$$\mathbf{F} = \left\{ \begin{array}{l} \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I} \\ \mathbf{u}(E + p) \end{array} \right\}. \quad (2.15)$$

Essas leis de conservação constituem as equações de Euler (29, 28). A equação da energia é a equação de transporte para a temperatura, e ao se considerar compressibilidade do fluido, a equação da continuidade é a equação de transporte para a massa específica. Para resolvê-la faz-se necessária a equação de estado do gás que relaciona  $T$  e  $\rho$ , ou  $e = e(p, \rho)$ . Para um gás ideal, ou termicamente perfeito, tem-se

$$p = \rho(\gamma - 1) \left( E - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2} \right). \quad (2.16)$$

Nessas condições, a energia total por unidade de volume,  $E$ , é relacionada com a temperatura segundo  $\partial E / \partial T = C_p$ . Para um modelo caloricamente perfeito,  $C_p$  é considerado constante, de modo que a temperatura é calculada diretamente.

### 2.2.2 Métodos Numéricos para leis de conservação

A resolução numérica das equações diferenciais parciais que regem o escoamento requer a discretização do domínio para se obter um sistema de equações algébricas. Para isso podem ser empregados o método de diferenças finitas, método dos elementos finitos, elementos de contorno ou pelo método dos volumes finitos (FVM) (30, 31).

No FVM um balanço das propriedades é realizado integrando-se em cada volume de controle a EDP. Nos termos advectivos é aplicado o teorema da divergência (Green - Gauss) resultando na forma fraca da equação (2, 31), tal qual a eq. (2.17),

$$\int_{V_i} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} dV_i + \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \tilde{\mathbf{F}}_{ij} \Delta S_{ij} = 0. \quad (2.17)$$

$\tilde{\mathbf{F}}_{ij}$  é a aproximação do fluxo advectivo projetado na direção normal local, calculado no ponto médio da fronteira (aresta ou face).

A utilização da forma conservativa assegura que se a solução converge conforme  $h \rightarrow 0$ , então a função limite será uma forma fraca (Teorema de Lax-Wendroff). A forma fraca física é a solução que satisfaz a condição de entropia (32).

O sistema de equações governantes dos fluidos pode ser resolvido de forma segregada ou com métodos que utilizam informações da autoestrutura (*eigensystem*) do problema. Estes últimos são baseados na solução do problema de valor inicial de Riemann (eq. 2.18), o qual permitiu o desenvolvimento de esquemas numéricos com qualidades desejáveis para problemas com descontinuidades.

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F} = 0$$

$$\mathbf{U}(x,0) = \begin{cases} \mathbf{U}^L & \text{se } x/t < 0 \\ \mathbf{U}^R & \text{se } x/t > 0 \end{cases} \quad (2.18)$$

Para obter uma aproximação do fluxo na interface do  $i$ -ésimo com o  $(i+1)$ -ésimo volume, Godunov propõe a utilização da solução de similaridade na forma conservativa da equação, tomando  $\mathbf{F}_{i+1/2} = \mathbf{F}(U_{i+1/2}(x/t))$ , com  $x/t = 0$ . A determinação de cada fluxo se torna a resolução de um problema de Riemann local, cujos estados  $\mathbf{U}^L$  e  $\mathbf{U}^R$  são aproximados pelos valores nos centróides dos volumes à esquerda e à direita da fronteira, respectivamente (32).

Muitas das informações extraídas na solução exata do problema de Riemann não são usadas e a aferição do comportamento dos estados nos campos característicos da solução exata, acabam resultando num algoritmo de maior custo computacional. Com isso,

Riemann *Solvers* aproximados foram desenvolvidos, permitindo a aproximação do campo característico da solução utilizando um número finito de ondas. Dentre eles o esquema de Roe e HLL e seus derivados (33, 34).

O método HLL consiste em construir o fluxo em cada face com duas ondas de perturbação não-lineares, emancipadas da interface de cada volume, e se propagam com velocidades características aproximadas para as máxima e mínima velocidades de propagação das ondas (35). O estado do campo característico intermediário é deduzido por uma condição de consistência expressa por uma relação integral (36).

Para problemas de posto 2, o método HLL replica a dimensão exata do autoespaço da solução, ou seja, dois autovetores formam a base para a solução. Entretanto, em problemas com posto maior, a aproximação não captura os fenômenos como esperado, pois a mesma não constitui uma base com todos os campos característicos da solução exata. A partir deste método, vários outros surgiram para corrigir a perda de resolução observada em descontinuidades, principalmente ao se resolver problemas de Magneto-hidrodinâmica e fluido-dinâmica de escoamentos compressíveis não adiabáticos ou reativos, cuja estrutura da solução é mais complexa.

Toro et al. em (37) propuseram o esquema HLLC com o acréscimo de uma onda de contato, linearmente degenerada, no campo característico intermediário do esquema HLL no problema unidimensional no espaço. A aproximação da solução, bem como o fluxo numérico correspondente são

$$\tilde{\mathbf{U}}(x,t) = \begin{cases} \mathbf{U}^L, & \text{se } \frac{x}{t} \leq S^L \\ \mathbf{U}^{*L}, & \text{se } S^L \leq \frac{x}{t} \leq S^* \\ \mathbf{U}^{*R}, & \text{se } S^* \leq \frac{x}{t} \leq S^R \\ \mathbf{U}^R, & \text{se } \frac{x}{t} \geq S^R \end{cases} \quad (2.19)$$

Para se obter os fluxos correspondentes a  $\tilde{\mathbf{U}}$  relações são determinadas aplicando-se a condição de salto de Rankine-Hugoniot em cada onda com velocidades determinadas pelos autovalores  $S^L, S^R$  e  $S^*$ . A condição de Rankine-Hugoniot é a relação que governa a forma e a velocidade das ondas de choque (24, 32).

$$\begin{cases} \mathbf{F}^{*L} = \mathbf{F}^L + S^L(\mathbf{U}^{*L} - \mathbf{U}^L) \\ \mathbf{F}^{*R} = \mathbf{F}^{*L} + S^*(\mathbf{U}^{*R} - \mathbf{U}^{*L}) \\ \mathbf{F}^{*R} = \mathbf{F}^R + S^R(\mathbf{U}^{*R} - \mathbf{U}^R) \end{cases} \quad (2.20)$$

Para o fluxo de Euler (eq 2.14), os autovalores  $S_*$  intermediários, são aproximados com o uso da equação de estado,  $S_L$  e  $S_R$  e por meio de considerações físicas nos campos

característicos intermediários (36). Desse modo, os fluxos ficam determinados como (2.21)

$$\mathbf{F} = \begin{cases} \mathbf{F}^L, & \text{se } 0 \leq S^L \\ \mathbf{F}^{*L}, & \text{se } S^L \leq 0 \leq S^* \\ \mathbf{F}^{*R}, & \text{se } S^* \leq 0 \leq S^R \\ \mathbf{F}^R, & \text{se } 0 \geq S^R \end{cases} \quad (2.21)$$

Esta análise com problemas unidimensionais permite a compreensão do processo de construção dos Riemann *solvers*. Para a resolução de problemas multidimensionais o método é aplicado para malhas cartesianas, encontrando-se os fluxos em cada fronteira como um procedimento de partição dimensional. Para as equações de Euler, a propriedade de invariância por rotação do fluxo permite a utilização de artifícios algébricos para rescrever o fluxo como  $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{F}(\hat{\mathbf{U}})$ , em que  $\mathbf{T}$  é uma matriz de rotação usada para se obter as variáveis características no referencial local de direção normal  $\nabla\hat{x}$  na face do elemento. Assim, o fluxo é avaliado com base nas variáveis conservativas rotacionadas 2.22.

$$\hat{\mathbf{U}}(\hat{x}, t) = \begin{cases} \hat{\mathbf{U}}^L = \mathbf{T}\mathbf{U}^L & \text{se } \hat{x}/t \leq S^L \\ \hat{\mathbf{U}}^{*L} = \mathbf{T}\mathbf{U}^{*L} & \text{se } S^L \leq \hat{x}/t \leq S^* \\ \hat{\mathbf{U}}^{*R} = \mathbf{T}\mathbf{U}^{*R} & \text{se } S^* \leq \hat{x}/t \leq S^R \\ \hat{\mathbf{U}}^R = \mathbf{T}\mathbf{U}^R & \text{se } \hat{x}/t \geq S^R \end{cases} \quad (2.22)$$

Este método privilegia as direções normais às faces dos elementos na construção do modelo de ondas, o que introduz erros quando os mesmos não são ortogonais, como em malhas com quadriláteros irregulares. Balsara em (38) propõe um método genuinamente multidimensional em malhas cartesianas para HLL e HLLC aplicáveis para muitos sistemas de equações hiperbólicas. Os principais critérios desejáveis para o desenvolvimento de Riemann *solvers* multidimensionais são também formalizados no trabalho.

O uso de malhas cartesianas pode gerar erros inaceitáveis nos contornos de geometrias complexas quando não utilizados métodos específicos para tratamento dos contornos, com isso são utilizados dois principais métodos de transformações de coordenadas. O método por coordenadas curvilíneas transforma o domínio físico em um domínio computacional cartesiano. A transformação de coordenadas obtida com o jacobiano impõe modificações na EDP original, entretanto não altera a sua hiperbolicidade. O outro método considera referenciais locais em cada elemento de forma generalizada, isto é, a base contravariante depende da geometria de cada elemento. No primeiro caso a malha é considerada estruturada, enquanto no segundo caso não-estruturada.

Em malhas não-estruturadas cada elemento pode assumir qualquer polígono ou poliedro, sendo seus nós, vértices e faces e de seus vizinhos alocados em matrizes de conectividade. Pela maior adaptabilidade à diferentes geometrias e característica análoga

ao paradigma de orientação a objetos, os softwares de CFD optam por este tipo de abordagem. Nas malhas estruturadas os elementos se distribuem em linhas e colunas de modo padronizado e com lógica na sua conectividade.

Abgral e Balsara em (39) formularam um Riemann *solver* genuinamente multidimensional baseado nos HLL e HLLC para malhas não-estruturadas, construindo campos por meio dos máximos autovetores das direções principais.

No FVM, o volume de controle pode ser centrado no elemento ou centrado no vértice do elemento (*Cell-centred-based* e *cell-vertex-based*, respectivamente). No caso de volumes centrados no vértice, os mesmos são construídos a partir dos centroides dos elementos vizinhos, o que requer mais memória, no entanto, facilita-se a aplicação de condições de contorno. Para volumes centrados no elemento, as variáveis são armazenadas nos centroides do volume, denominado arranjo co-localizado. No HLLC multidimensional a aproximação dos estados é feita pela condição de similaridade em cada vértice da malha primal (original).

A forma conservativa das equações impõe a necessidade de aproximações dos fluxos convectivos nas faces. Uma forma de fazê-la é aplicar uma expansão de Taylor ao redor do centroide  $i$  do volume de controle (2, 31, 30), denominado esquema *Linear Upwinding Differencing Scheme* (LUDS).

$$\phi_f = \phi_i + (\nabla\phi)_i \cdot \delta\mathbf{r} + \mathcal{O}(|\delta\mathbf{r}|^2) \quad (2.23)$$

Truncando a expressão no segundo termo da série o esquema tem-se um esquema de ordem de convergência teórica 2. A aproximação do gradiente na expressão pode ser feita por mínimos quadrados ou pela aproximação Green-Gauss (2), tal como

$$\nabla\phi \approx \frac{1}{V_j} \sum_{i \in \mathcal{N}(j)} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \Delta S_{ij}. \quad (2.24)$$

Esquemas de alta ordem podem introduzir oscilação não-física na solução e para solucionar isto foram desenvolvidos baseados em total variação os métodos TVD (*Total Variation Diminishing*). O conceito de Total Variação surge na busca de critérios de estabilidade para problemas lineares, de modo a se garantir a convergência, uma vez que a forma conservativa não garante convergência. Define-se a Total Variação para soluções  $\phi_k$  em um domínio discreto com  $N$  pontos como  $TV(\phi) = |\phi_2 - \phi_1| + \dots + |\phi_N - \phi_{N-1}|$ . A solução  $\phi$  é TVD se a monotonicidade descrita pela relação  $TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n)$  é satisfeita para qualquer iteração  $n$ . Desse modo, impõe-se a condição de TVD na construção de esquemas numéricos visando a não ocorrência de oscilações numéricas em esquemas de alta ordem (31).

A aproximação do fluxo nas faces é escrita como a soma de um termo difusivo de primeira ordem *Upwind* e um termo antidifusivo (40). Desse modo, reescrevendo-se o fluxo  $\phi_f$  como

$$\phi_f = \phi_C + \frac{1}{2}\psi(r_f)(\phi_D - \phi_C), \quad (2.25)$$

$$r = \frac{\phi_C - \phi_U}{\phi_D - \phi_C}. \quad (2.26)$$

A construção de um esquema TVD consiste em se determina a região do plano  $r - \psi$  em que o limitador de fluxo  $\psi(r)$  (*flux limiter*) resulta em um esquema monótono. D é o centroide do volume à jusante da face f, C é o centroide do volume à montante da face f e U é um nó construído à montante de C e colinear com C e D. Considera-se um escoamento com fluxo do volume C para o volume D.

Demonstra-se pelo critério que alguns esquemas são TVD, como o esquema de Godunov e a sua extensão de segunda ordem, MUSCL-Hancock. Neste último esquema, as variáveis  $U^R$  e  $U^L$ , podendo ser variáveis primitivas ou conservativas, são reconstruídas antes de serem avaliados nos fluxos, e, então, cada problema de Riemann local é resolvido para esses novos valores extrapolados (36). Desse modo,

$$\mathbf{U}_i^L = \mathbf{U}_i^n - \frac{1}{2}\Delta_i; \quad \mathbf{U}_i^R = \mathbf{U}_i^n + \frac{1}{2}\Delta_i, \quad (2.27)$$

onde  $\Delta_i$  é um *slope limiter* ou vetor diferença.

## 2.3 Programas de código aberto para CFD

Nesta seção serão apresentadas algumas generalidades sobre os *softwares* com foco em sua utilização, não esgotando os seus recursos, tampouco serão abordados os detalhes das implementações. Para uma compreensão aprofundada recomenda-se a leitura dos artigos referenciados, bem como a consulta ao site ou repositórios das implementações.

### 2.3.1 SU2

O SU2 (*Stanford University Unstructured*) é um código aberto com licença GNU com diversos *solvers* voltados a fluidos, otimização e elementos finitos desenvolvidos em C++ e em Python. Oferece ao usuário final os principais esquemas advectivos *Upwind* e Centrais baseados no método dos Volumes finitos, para a resolução de problemas em dinâmica de gases.

Na discretização espacial de Euler, o código aplica o teorema da divergência de Gauss na eq. (2.14).

$$\int_{V_i} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} dV + \underbrace{\sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \tilde{\mathbf{F}}_{ij} \Delta S_{ij}}_{R_i(\mathbf{U})} = 0 \quad (2.28)$$

O SU2 avalia o fluxo em todas as fronteiras dos volumes de controle da malha dual para, desta forma, calcular o resíduo  $R_i(\mathbf{U})$  da integração numérica em cada nó da malha (41, 42). O critério de convergência pode ser pelo erro quadrático médio de alguma variável conservativa ou primitiva ou pelo critério de Cauchy, baseado no resíduo calculado. Para os métodos implícitos no tempo a solução do resíduo  $\mathbf{R} = [R_1 \ R_2 \ \dots \ R_n]^T$  quando não-linear é obtida com uma expansão de Taylor no tempo de  $\mathbf{R}$ , aproximada com métodos quase-Newton.

Para o cálculo de gradientes, o código fornece a opção do método por mínimos quadrados ou pelo método de Green-Gauss, sendo este ultimo o utilizado neste trabalho e cuja aproximação é aquela da eq. (2.24).

Tem em sua implementação métodos diretos e iterativos para a resolução dos sistemas de equações, além de oferecer preconditionadores para matrizes esparsas e métodos implícitos e explícitos no tempo para problemas transientes.

As instruções de execução são alocadas em um único arquivo de texto ASCII, utilizando-se de *solvers* específicos por modelo matemático resolvidos por volumes finitos ou elementos finitos (Navier-Stokes, Euler e Reynolds *Averaged* Navier-Stokes).

Utiliza uma estrutura de arquivo de malha própria .su2, suportada por alguns programas de geração de malha, dentre eles o GMSH. O SU2 emprega malhas não estruturadas, com volumes centrados nos vértices dos elementos (41).

### 2.3.2 OpenFOAM

O OpenFOAM é um programa livre e de código aberto, de licença GNU, destinado a resolver problemas de CFD (problemas de mecânica do contínuo) escrito na linguagem C++. A aplicação consiste em arquivos de dicionários específicos disponibilizados em árvore de diretórios.

No diretório `\0` estão os dicionários das condições iniciais e de contorno das variáveis do problema.

Em `\constant` estão os dicionários *thermo* e *turbulence* destinados a receber as definições dos modelos termofísicos e de transporte e as características laminar ou turbulenta do escoamento. Neste diretório também se encontra diretório `\polyMesh`, onde

a malha é definida.

Em `\system` encontram-se os dicionários `fvScheme` e `fvSolutions`. Em `fvScheme` são definidos os esquemas numéricos para a discretização temporal e espacial, e métodos para aproximação de gradiente, divergente e fluxos. Em `fvSolutions` são definidos os algoritmos e parâmetros dos métodos de resolução dos sistemas de equações, podendo ser iterativo ou diretos. Os condicionadores das matrizes também são definidos neste arquivo.

Ainda neste diretório encontra-se o arquivo `controlDict` responsável pelas definições de saída e do `solver` a ser utilizado.

Essas definições são alocadas nos arquivos conforme a estrutura abaixo. "Nome do dicionário" é o nome de alguma Classe instanciada com as definições declaradas entre as chaves.

```

<Nome do dicionário>
{
    :
    Definições
    :
}

```

Por exemplo, `ddtSchemes`, `gradSchemes` e `divSchemes` são os nomes das classes para a definição dos esquemas de discretização temporal, de aproximação de gradientes e de divergentes, respectivamente.

Para problemas de dinâmica de gases, `solvers` específicos estão disponíveis, como o `rhoPimpleFoam` baseado em algoritmos de acoplamento densidade-pressão-velocidade PIMPLE, utilizando o método de volumes finitos.

As condições de contorno são configuradas no arquivo `\boundary` em `constant\polyMesh`, diretório criado na execução do `gmshToFoam` (discorrido na próxima seção), e em cada diretório associado às variáveis do problema, localizados em `\theta`, isto é, `0\u`, `0\T` e `0\p`.

O OpenFOAM se utiliza de malhas não estruturadas, com volume centrado no elemento, e arranjo de variáveis co-localizado.

### 2.3.3 Malhas e o utilitário GMSH

O GMSH é um programa destinado a produção de malhas numéricas ou para pós-processamento escrito em C++ e licenciado sob os termos GNU. As especificações da malha são alocadas em arquivo de texto utilizando uma linguagem de script própria. Também possui interface de programação de aplicação em C++, Python, Julia ou C;

Oferece ao usuário algoritmos de geração de malha baseado em triangulação de Delaunay, além de geração de malhas de alta ordem para MEF.

Para a geração de malhas nativas do SU2, exporta-se o arquivo diretamente com extensão *.su2*. Para malhas do OpenFoam exporta-se um arquivo nativo do GMSH, *.msh* de codificação ASCII 2, que deve ser convertido em formato compatível com o OpenFoam pelo utilitário *gmshToFoam*.

Para que os softwares de CFD reconheçam os contornos deve-se atribuir rótulos às entidades geométricas que definem os contornos da malha. No GMSH, o rótulo para um contorno 2D é definido acrescentando-se na linha de comando a sintaxe “*Physical Curve*(“rótulo”, I) = {J};”. Neste caso, I é o inteiro identificador do contorno e J um inteiro previamente alocado como identificador da curva (Objeto *Line*, *Circle* ou gerado por *spline*). Para contornos 3D, utiliza-se a sintaxe “*Physical Surface*”.

Esta lógica é a mesma para a criação das entidades geométricas da malha, atribuindo-se inteiros para as mesmas e identificando os pontos ou elementos que as compõem. Por exemplo, dados dois pontos  $(x_a, y_a)$  e  $(x_b, y_b)$  um segmento de reta entre esses dois pontos (Objeto *Line*) é criado de modo semelhante à criação de um *Array* em C++, com “*Line*[J] = { $x_a, y_a, x_b, y_b, l$ };”, com  $l$  sendo o número de nós entre a linha.

O tipo e a qualidade da malha podem afetar a convergência ou acrescentar erros numéricos (43). Os principais parâmetros de qualidade da malha são apresentados a seguir. A **Não-Ortogonalidade** é definida como o ângulo entre o segmento que une o centro dos volumes e o vetor normal a área comum entre os volumes. Este ângulo deve ser o menor possível. Uma medida desse parâmetro é determinada tomando-se o arco-cosseno da projeção do vetor que une os centroides normalizado na direção normal à face, tal como  $(x - x') \cdot \mathbf{n} / \|x - x'\|$ , onde  $x$  e  $x'$  são as coordenadas dos centroides de dois volumes vizinhos com uma face em comum de normal  $\mathbf{n}$ .

Outra métrica de qualidade de malha é a distorção que ocorre entre dois elementos vizinhos. Uma forma de calculá-la é pela distância entre o centro da face comum e o ponto em que o segmento que une os centroides intersecta a face, denominada **Skewness**. Se essa distância se anula, tem-se elementos não distorcidos. Portanto, valores próximos a 0 são desejáveis.

E por fim, a **Uniformidade** ou razão de aspecto dos elementos. Considerando-se as faces de um dado elemento, é determinada pela razão entre a maior e a menor aresta ou área do mesmo. Para essa métrica valores próximos a 1 são desejáveis.

A escolha dos elementos tem influência na acurácia da solução numérica nos métodos de Volumes finitos. Para malhas 2D, utilizando-se métodos de acoplamento Pressão-Velocidade os erros foram maiores para elementos triangulares e os menores para elementos quadriláteros (43).

## 2.4 Verificação e Validação em CFD

As soluções numéricas estão sujeitas a diversas fontes de erros e para se estabelecer o erro em que se incorre uma solução numérica pode-se calcular diretamente, quando provida uma solução analítica, ou estimá-lo com métodos que utilizam refinamento de malha. Para muitos problemas práticos não se tem disponível uma solução analítica, dessa forma, os procedimentos de verificação e validação permitem quantificar a incerteza de uma solução, bem como determinar malhas que conduzam a um erro e custo computacional aceitáveis para os propósitos (44).

A verificação de uma solução numérica permite se analisar quão bem um método numérico resolve um modelo matemático enquanto a validação atua na determinação da coerência do modelo com a realidade (3).

A estimativa do erro numérico é calculada com  $|\phi - \tilde{\phi}|$ , onde  $\tilde{\phi}$  é uma estimativa da solução exata. Seja  $h_g$  o parâmetro de malha obtida pelo refinamento com razão  $q$ , isto é,  $h_g = qh_{g-1}$ ,  $g \in \{1, 2, 3, 4\}$  e  $h_g < h_{g-1}$ . A estimativa do erro por meio do método GCI (*Grid Convergence Index*) para a  $g$ -ésima malha é

$$\hat{E} = C_s \frac{|\phi_g - \phi_{g-1}|}{q^p - 1}. \quad (2.29)$$

Na equação (2.29)  $\phi_g$  e  $\phi_{g-1}$  são as soluções numéricas com a malha  $g$  e com a malha  $g - 1$ , respectivamente. O expoente  $p$  é uma ordem de convergência, calculada com  $\min\{p_L, p_U\}$ .  $C_s$  é um fator de segurança maior do que 1,25.  $p_L$  é a ordem assintótica teórica.  $p_U$ , denominado ordem aparente, é a inclinação local da curva do erro aparente em função do refinamento da malha em escala logarítmica (2.30)

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{|\phi_g - \phi_{g-1}|}{|\phi_{g-1} - \phi_{g-2}|}\right)}{\log(h_g/h_{g-1})} \quad (2.30)$$

Desse modo, uma solução numérica com sua estimativa de erro é  $\tilde{\phi} = \phi_g \pm |\hat{E}|$ . Um estimador é dito acurado quando a estimativa do erro é próxima do erro real ( $\hat{E} \approx E_{\text{verdadeiro}}$ ) e é dito confiável se a estimativa do erro é superior ou igual ao erro real, ( $\hat{E} \geq |\phi_{\text{exato}} - \phi_g|$ ). Posto isso, o método GCI é acurado e confiável para comportamento sub ou superconvergente para  $C_s \geq 1$ .

## 2.5 Aprendizado de Máquina

Algoritmos de aprendizagem de máquina - ou *Machine Learning*, anglicismo adotado pelo recente surgimento do tema -, são um ramo da inteligência artificial focado em construir aplicações que aprendem por meio de dados sem ser programada para isso.

A inteligência artificial é definida como a capacidade de computadores de reproduzir aspectos da inteligência humana, e as redes neurais artificiais (ANN) compreendem um dos algoritmos de ampla aplicação na atualidade.

As redes neurais multicamadas foram inspiradas no estudo neuroanatômico de Hubel e Wiesel em (45). Embora a origem da modelagem do algoritmo de redes neurais seja bioinspirada, uma formalização baseada em geometria Riemanniana é proposta em (46). Pode-se entender o algoritmo de redes neurais multicamadas como um procedimento de transformação de coordenadas de dados invariantes. Cada camada representa um sistema de coordenadas e a função de transferência (comumente denominada função de ativação ao se utilizar a perspectiva bioinspirada) é uma transformação de coordenadas para certas funções que contemplam propriedades de métrica (positiva-definida para a métrica de Riemann) (47).

O processo Gaussiano (GP) também é compreendido como método de aprendizado de máquina. Diferente de métodos de regressão por modelos lineares (nos parâmetros) em que uma forma funcional deve ser assumida, a regressão por GP é compreendida como um método não-paramétrico, não-linear e cujo modelo é construído com base nos dados.

Demonstra-se que ao se fazer tender ao infinito o número de nós numa rede neural artificial de uma única camada escondida, para certas funções de transferência definida positiva, o modelo tende a um processo Gaussiano (48).

Além disso, com análise funcional demonstra-se que redes neurais artificiais aproximam quaisquer funções quando o número de nós é suficientemente grande. Desse modo, é evidente a afinidade matemática entre esses dois métodos, e que são utilizados neste trabalho.

### 2.5.1 A rede neural Multilayer Perceptron

Uma rede neural *Multilayer perceptron* com  $L$  camadas e  $L - 2$  camadas ocultas é descrita por

$$y^{(i)} = \begin{cases} y^{(0)}, & \text{se } i = 0 \\ f(W^{(i-1)}y^{(i-1)} + b^{(i-1)}), & \text{se } 1 \leq i \leq L \end{cases} \quad (2.31)$$

O índice sobrescrito denota a camada na qual o vetor de parâmetros pertence. A função  $f$  é a função de ativação transferência, sendo que as mais utilizadas na literatura

são a função logística (eq. 2.32) e ReLu (eq. 2.33), e através dessas funções o modelo é capaz de extrair não-linearidades.

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}, \quad (2.32)$$

$$f(x) = \max(0, x). \quad (2.33)$$

O conjunto  $\{y^{(0)}, y^{(L)}\}$  são dados de fatores e a resposta a esses fatores, respectivamente. Com esses dados, o objetivo é minimizar o erro  $\zeta$  da aproximação  $\hat{y}^{(L)} = NN(\mathbf{W}, y^{(0)})$  pela rede. Este procedimento de otimização dos parâmetros  $\mathbf{W}$  é denominado treinamento supervisionado e é realizado com o método de retro-propagação do erro na correção do parâmetros.

O erro é calculado por  $\zeta = \|y^{(L)} - \hat{y}^{(L)}\|$ , onde  $\|\cdot\|$  é uma norma, tipicamente a norma  $L_2$ . Com isso, calcula-se recursivamente o gradiente  $\partial\zeta/\partial w_{ij}^{(l)}$ , utilizando-se a regra da cadeia (49, 50).

Ao se trabalhar com muitas camadas, este procedimento pode se tornar computacionalmente oneroso. As bibliotecas de inteligencia artificial TensorFlow e PyTorch, da Google e Facebook respectivamente, fornecem métodos de auto-diferenciação que calculam derivadas de modo eficiente utilizando o grafo computacional do procedimento *just in time* (51).

Com a função objetivo dada por  $\zeta$ , procedimentos de otimização são utilizados a fim de se determinar os parâmetros  $\mathbf{W}$  minimizadores deste erro. Os mais utilizados são baseados em gradiente, com aproximações da inversa da Hessiana.

Os métodos de otimização de Newton são robustos e encontram minimizadores com menor número de iterações, no entanto o cálculo de inversas de Hessianas são de pouca eficiência computacional. Com isso, são utilizados os métodos quase-Newton, com procedimentos de aproximações da Hessiana. Dada uma função objetivo  $\zeta : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , uma direção de busca de um minimizador de  $\zeta$  é escrita como

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \bar{\eta}d \quad (2.34)$$

Então, o método de primeira ordem por gradiente, ou de Cauchy, é obtido com  $d = -\nabla\zeta(x^{(k)})/\|\zeta(x^{(k)})\|$ , e o método quase-Newton com  $d = -\hat{H}\nabla\zeta(x^{(k)})$ , onde  $\hat{H}$  é uma aproximação para a inversa da Hessiana,  $\nabla^2\zeta^{-1}$ .

Na perspectiva de aprendizado de máquina, o fator  $\bar{\eta}$  é um hiperparâmetro denominado *taxa de aprendizado*. Este fator pode ser determinado com o método de Armijo-Wolf-Goldstein (52).

## 2.5.2 O Processo Gaussiano

Um processo Gaussiano é uma distribuição sobre funções tal que qualquer coleção finita  $\{f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n)\}$  possui uma distribuição conjunta Gaussiana. Um  $\mathcal{GP}$  fica especificado por uma média  $\mu = \mathbb{E}[f(\mathbf{x})]$  e uma função de covariância  $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{E}[(f(\mathbf{x}) - \mu(\mathbf{x}))(f(\mathbf{x}') - \mu(\mathbf{x}'))]$  (48, 53). A densidade multivariada conjunta é dada por

$$p(f|\mu, K) = (2\pi)^{-n/2} \det(K)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(f - \mu)^T K^{-1}(f - \mu)\right\}, \quad (2.35)$$

onde  $\mu$  é um vetor  $n \times 1$  e  $K$  é  $n \times n$ , simétrica e positiva definida. Esta última condição permite a aplicação da fatoração de Cholesky em implementações computacionais (6).

A regressão com processo Gaussiano é realizada conforme disposto a seguir. Seja  $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}^i\}_{i=1}^n$ , com  $\mathbf{x}^i \in \mathbb{R}^d$ , e  $\mathbf{f} = \{\mathbf{f}^i\}_{i=1}^n$  conjuntos de dados de treinamento em que  $\mathbf{f}^i$  é a resposta do vetor aleatório  $\mathbf{x}^i$  em  $\mathbf{X}$ . Além disso, seja  $\mathbf{x}^*$  um conjunto de  $m$  pontos para o qual se deseja estimar  $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{f}^*$ . Então, considerando-se um processo Gaussiano com média 0 e covariância  $\mathbf{K}$ , tem-se

$$\begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{f}^* \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}\left(0, \begin{bmatrix} K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) & K(\mathbf{X}, \mathbf{X}^*) \\ K(\mathbf{X}^*, \mathbf{X}) & K(\mathbf{X}^*, \mathbf{X}^*) \end{bmatrix}\right). \quad (2.36)$$

A covariância da distribuição normal acima é construída com matrizes em blocos tal que cada bloco é uma matriz de Gram. Além disso, se  $\mathbf{X}$  tem  $n$  elementos e  $\mathbf{X}^*$  tem  $m$  elementos, então  $K(\mathbf{X}^*, \mathbf{X})$  é uma matriz  $m \times n$ . Neste caso, as observações  $\mathbf{f}$  não possuem ruído branco.

A regressão por esse processo estocástico derruba a assunção de independência dos erros, pois se  $f(x)$  é contínua então  $\epsilon(x)$  também o será. Desse modo, se  $x$  e  $x'$  são pontos próximos, então os erros  $\epsilon(x)$  e  $\epsilon(x')$  também o serão (8).

Existem várias formas para construção da matriz de covariância, cuja função é selecionada segundo o comportamento da resposta. A função de covariância RBF é tal que

$$K(x, x') = \sigma_0 e^{-\|x - x'\|^2}, \quad (2.37)$$

onde a métrica  $\| \cdot \|$  é dada por

$$\|x - x'\|^2 = \sum_{i=1}^N \theta_i (x_i - x'_i)^2 \quad \text{com } \theta_k \geq 0. \quad (2.38)$$

Essa função de covariância é invariante por movimentos rígidos (isotrópica) e, portanto, estacionária. Uma vez que a mesma é infinitamente diferenciável apresenta comportamento muito suave (48, 6).

Os hiperparâmetros  $\theta_k$  são determinados com o formalismo Bayesiano. Diferente da escola frequentista em que parâmetros são valores representativos de uma população com certo nível de significância, na escola Bayesiana é possível se atribuir distribuições a estes parâmetros. Em outras palavras, todos os parâmetros são variáveis aleatórias.

Parte-se da densidade de probabilidade *a priori*,  $p(\theta)$ , que é modificada utilizando-se o conjunto de dados de treino  $D_n = \{(\mathbf{x}^i, \mathbf{f}^i)\}_{i=1}^n$ ; por simplicidade, os conjuntos da forma  $\{\mathbf{f}^i\}_{i=1}^n$  serão escritos como  $\mathbf{f}_{1:n}$ .

Condicionando-se a distribuição conjunta  $p$  aos dados  $D_n$ , isto é, fazendo  $p(\theta|f_{1:n})$ , tem-se uma restrição no espaço funcional de modo a descrever a densidade de probabilidade sobre as funções que satisfazem o conjunto de treino (6). Portanto, determina-se  $\theta$  (ou  $\mathbf{f}^*$ ) maximizando-a por meio da regra de Bayes, ou seja,

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmax}_{\theta} p(\theta|f_{1:n}), \quad (2.39)$$

com  $p(\theta|f_{1:n}) = p(f_{1:n}|\theta)p(\theta) / \int p(f_{1:n}|\theta')p(\theta')d\theta'$ .

O denominador é um fator de normalização independente de  $\theta$  que pode ser desconsiderado. Outra forma é maximizando-se o logaritmo da função de verossimilhança marginal, que para processos gaussianos tem-se uma função analítica (53).

### 2.5.3 Validação de modelos por aprendizado de máquina

O processo de validação de um modelo consiste em se determinar a capacidade de generalização do mesmo, isto é, determinar o erro que se incorre ao avaliar o modelo num ponto não pertencente ao conjunto de treino. Para isso são utilizados os métodos *holdout*, *k-fold* e *leave-one-out* (54).

O método *holdout* consiste em se dividir o conjunto de dados  $\{y^{(0)}, y^{(L)}\}$  de modo que uma parte é utilizada para o procedimento de treinamento do modelo, e a outra parte para se analisar a acurácia do mesmo aplicando-se o modelo na fração não utilizada no treinamento.

O método *k-fold* é uma extensão do método *holdout*, e consiste em um método de re-amostragem em que se divide o conjunto de dados em  $p$  conjuntos independentes, com mesma quantidade de elementos ou uma quantidade próxima. Então  $(p - q)$  conjuntos são destinados ao treinamento e  $q$  são utilizados no teste.

O método *Leave-one-out* é análogo ao método *k-fold*, tomando-se  $p$  igual ao número de elementos, tornando o procedimento mais oneroso.

As métricas para análise de erro utilizadas são o erro absoluto médio (MAE) e o

erro quadrático médio (RMSE), dados respectivamente por

$$RMSE = \sum_j \frac{\|y_j^{(L)} - \hat{y}_j^{(L)}\|_2^2}{N} \quad (2.40)$$

e

$$MAE = \sum_j \frac{\|y_j^{(L)} - \hat{y}_j^{(L)}\|}{N}, \quad (2.41)$$

onde  $N$  é o número de entradas da variável resposta em cada reamostragem.

## 2.6 Métodos de Otimização

Nesta seção são apresentadas duas técnicas de otimização apropriadas para aplicação com funções caixa-preta.

### 2.6.1 Algoritmos Genéticos

Os algoritmos genético são métodos de otimização probabilístico, meta-heurístico, inspirado na evolução genética. Diferente dos métodos Newton ou quase-Newton, este método não depende de gradientes ou hessianas o que permite a otimização de funções objetivos não diferenciáveis.

O primeiro passo é selecionar o número de gerações (ou algum critério de parada) e um conjunto aleatório de soluções que constituirão a população inicial  $\Omega_0$ . Nesta população operações de recombinação, mutação, *crossover* e cruzamento serão aplicadas inicialmente de modo a determinar uma população “melhorada”. Esta melhoria é determinada por uma função de aptidão (a função objetivo do problema) a ser maximizada com o procedimento.

Originalmente, o método usa esquemas de representação dos elementos da população (cromossomo), transformando cada cromossomo da população numa *string* de um conjunto de símbolos (alfabeto) (55). Costuma-se utilizar a representação binária  $\{0, 1\}$ , assumindo-se 1 para a presença de determinada característica e 0 em caso de ausência. No entanto, para busca em domínios no conjunto dos reais, constata-se que a utilização de vetores de números reais se mostra mais eficiente em termos de tempo de CPU.

Para se construir um novo conjunto, dois esquemas de seleção são utilizados: torneio e roleta (56). No esquema de seleção por roleta, após o cálculo da função objetivo  $f_{apt}$  para cada cromossomo, um conjunto de mesma cardinalidade de  $\Omega_0$  é criado com cada elemento tendo associada uma probabilidade calculada por

$$\frac{f_{apt}(k)}{\sum_k f_{apt}(k)}. \quad (2.42)$$

Cada um dos  $n(\Omega)$  elementos é selecionado para compor este novo conjunto de modo que a presença de determinado indivíduo em cada índice é proporcional a sua probabilidade associada.

No método por torneio uma amostragem aleatória de dois indivíduos é realizada e suas  $f_{apt}$  são comparadas. O indivíduo com maior aptidão é selecionado.

Após a seleção aplica-se o *crossover*, que consiste em se tomar um par de cromossomos e gerar uma “prole” a partir do intercâmbio da combinação de partes dos seus cromossomos. No problema de otimização que se estuda neste trabalho, um novo vetor de características geométricas é construído com a recombinação de parâmetros de geométricos que terão a sua função objetivo reavaliada. Nessa etapa uma probabilidade  $p_{cr}$  de seleção para cada indivíduo é considerada (55, 56).

Após o *crossover*, os cromossomos que geraram a prole são substituídos pela prole e, então, após a substituição, aplica-se o processo de mutação que consiste em mudar aleatoriamente posições da *string* de um cromossomo selecionado do conjunto com uma probabilidade  $pm$ . Com essas operações uma nova população é construída e o procedimento é repetido até se alcançar o número de gerações definido.

### 2.6.2 Otimização Bayesiana com Processo Gaussiano

A Otimização Bayesiana é um método de otimização de funções caixa-preta, não fazendo uso de derivadas da função aproximada. A busca pelo maximizador global é feita via otimização de uma função de aquisição de menor custo do que o procedimento de se obter novas respostas, e que expressa quão viável é se avaliar a resposta em determinado ponto.

A aproximação da função objetivo obtida com um processo estocástico, neste caso o processo gaussiano, é usada na construção da função de aquisição baseada em uma função utilidade. Para o método da melhoria esperada, EI (do inglês *expected improvement*), num problema de maximização, avalia-se o argumento maximizador da esperança da função utilidade  $I(x, \tau, \theta) = \max\{0, f(x) - \tau\}$ , onde  $f(x) - \tau$  é a melhoria com o novo valor observado  $f(x)$  em relação ao último máximo  $\tau$  (53). Tomando-se a esperança de  $I = I(x, \tau, \theta)$  com  $f$  um GP de média  $\mu_n$  e variância pontual  $\sigma_n$ , o que permite ser calculado analiticamente, tem-se a função aquisição para o método EI

$$a_{EI} = (\mu_n(x) - \tau)\Phi\left(\frac{\mu_n - \tau}{\sigma_n(x)}\right) + \sigma_n(x)\varphi\left(\frac{\mu_n - \tau}{\sigma_n(x)}\right), \quad (2.43)$$

onde  $\varphi$  é a densidade de probabilidade normal padronizada e  $\Phi$  é a distribuição cumulativa normal.

---

A escolha da função de aquisição tem consequências na priorização de buscas em regiões com grande incerteza (exploração) ou na continuidade da busca em uma região com um maximizador local. Um grande viés de exploração pode elevar o custo computacional do algoritmo, enquanto que o oposto pode resultar na falha na busca pelo máximo global, confinando a busca nas vizinhanças de um maximizador local.

### 3 METODOLOGIA

Neste capítulo são apresentadas as considerações termo-físicas, condições de contorno e geometrias resolvidos pelo SU2 e pelo OpenFOAM, bem como as assunções e resultados relativos ao processo de Verificação e Validação, a saber malhas e método para estimação de erros e ordem de convergência que foram usados na seleção do software e do modelo. Por fim, são apresentados os métodos de aprendizado de máquina usados para a otimização das geometrias consideradas.

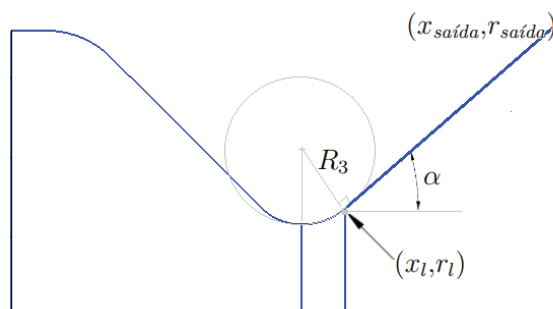
#### 3.1 Modelos termofísicos, de transporte e geometrias dos bocais

O escoamento real no interior do bocal convergente-divergente é compressível, com regiões de velocidades supersônicas. Há efeitos viscosos e transferência de calor nas superfícies e o equilíbrio químico não necessariamente é observado, com possível dissolução de moléculas gasosas. Entretanto, neste trabalho são assumidas certas simplificações para o escoamento compressível.

Tomou-se como fluido o ar atmosférico, considerado como mono-espécie, com constante de gás perfeito igual a 286,9 J/kg.K. O calor específico a pressão constante foi considerado constante e calculado pelas relações de gás perfeito  $C_p - C_v = R$  e  $\gamma = C_p/C_v$ ; a pressão de estagnação foi tomada como 1725 kPa, temperatura de estagnação de 833,33 K ( $1500^\circ R$ ) e razão de calores específicos de 1,35.

Sob essas condições, serão otimizados parâmetros das seguintes geometrias para a seção divergente do bocal C-D: cônica e parabólica. Para o divergente cônico, o parâmetro geométrico a ser otimizado, maximizando a função objetivo definida pelo coeficiente de empuxo, é a inclinação  $\alpha$  da geratriz da seção cônica do divergente em relação ao eixo de simetria e o raio de curvatura  $R_3$ . Os parâmetros geométricos literais são indicados na fig. 3.

FIGURA 3 – SEÇÃO DIVERGENTE CÔNICA



FONTE: o autor (2020).

O intervalo de busca de  $\alpha$  considerado é  $[10^\circ, 30^\circ]$ , enquanto  $R_3$  foi limitado em

[0,2 , 1,5]. As condições termodinâmicas para este caso foram pressão e temperatura de estagnação no *plenum* iguais a 1725kPa e 833,33K, respectivamente. Condição de operação de vácuo na saída.

Para o divergente parabólico, são otimizadas a inclinação da tangente no ponto de inflexão  $(x_l, r_l)$  e o raio  $R_3$  da seção circular após a garganta do bocal (raio do círculo osculador). As hipóteses para a construção do divergente são apresentadas a seguir.

Seja a equação da parábola não rotacionada

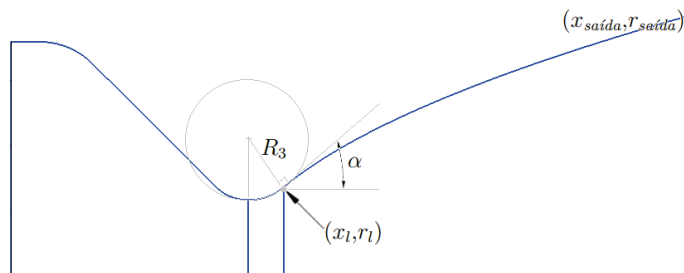
$$\Gamma : x = a_2 + a_1 r + a_0 r^2 \quad (3.1)$$

A parábola fica determinada conhecendo-se os coeficientes  $a_i, i \in \{0, 1, 2\}$ . O ponto da extremidade do arco de circunferência da garganta do bocal pertence a parábola, logo  $(x_l, r_l) \in \Gamma$ .

Mantendo-se o comprimento da tubeira constante, as coordenadas da seção de saída do bocal são dados do problema, sendo um ponto pertencente a parábola, isto é,  $(x_{saída}, r_{saída}) \in \Gamma$ .

A terceira condição é obtida com a imposição de a inclinação da tangente no ponto  $(x_l, r_l)$ , avaliada pelo círculo osculante, ser igual à tangente avaliada pela expressão da parábola neste ponto. Esta condição impõe suavidade no perfil e continuidade na derivada da curva do mesmo.  $(x_l, r_l)$  é um ponto de inflexão, e determina o início da expansão do escoamento. Os parâmetros mencionados estão dispostos na figura 5.

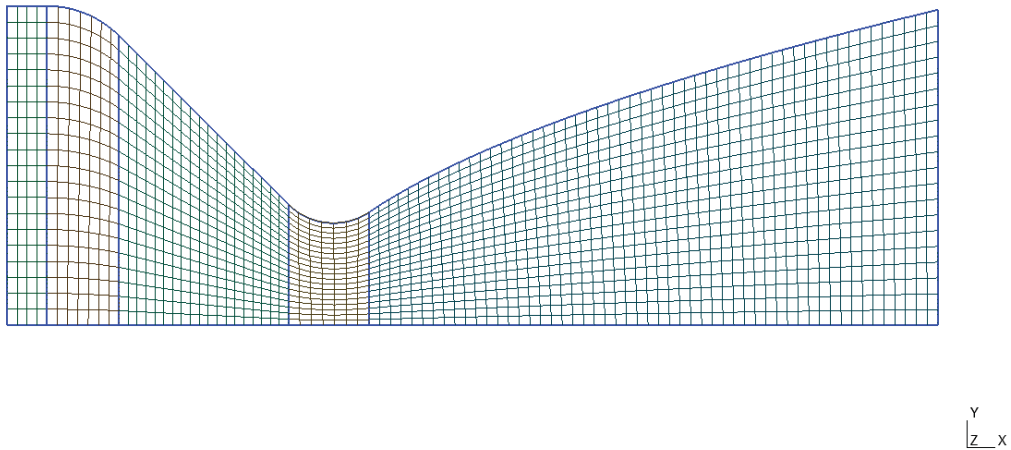
FIGURA 4 – PARÂMETROS GEOMÉTRICOS DO BOCAL DIVERGENTE PARABÓLICO



FONTE: o autor (2020).

Os parâmetros geométricos a serem otimizados, maximizando a função objetivo definida pelo coeficiente de empuxo, são o raio de curvatura  $R_3$  e o ângulo de inclinação  $\alpha$  da parábola no ponto de inflexão. Os parâmetros geométricos literais são indicados na imagem. Considerou-se  $\alpha \in [\pi/7, \pi/3]$  e  $R_3 \in [0,2, 1,5]$ , e foram utilizadas malhas de  $1440 \times 160$  na obtenção das soluções.

FIGURA 5 – MALHA MN - PARABÓLICA.



FONTE: O autor (2020).

Um vez que o objetivo deste trabalho é a otimização da seção divergente, as características da seção convergente foram mantidas inalteradas. Para tanto, a configuração utilizada faz-se disposta na figura ref. É a mesma configuração do convergente do bocal com semiângulo do convergente de  $135^\circ$  de (4).

### 3.2 Condições de Contorno

A modelagem das condições de contorno no bocal C-D é feita conforme disposto abaixo. Também são apresentadas as configurações utilizadas no SU2 e no OpenFOAM. Estas condições de contorno foram utilizadas tanto na Validação e Verificação, quanto nas soluções voltadas à otimização.

A parede do bocal é considerada adiabática e sem fluxos na direção normal à superfície (impermeabilidade) e condição de **escorregamento**.

$$\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (3.5)$$

Na linha de simetria do bocal não há variação de propriedades na direção normal deste contorno, tampouco entrada ou saída de massa por essa fronteira. Deste modo,

$$\frac{\partial T}{\partial x_2} = 0, \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x_2} = 0, \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_2} = 0, \quad (3.8)$$

e

$$u_2 = 0. \quad (3.9)$$

O índice 1 denota a direção axial e o índice 2 a direção radial do sistema de coordenadas.

Na saída da tubeira não há variação nas propriedades na direção normal a esse contorno, isto é, o fluido deixa o bocal com as propriedades em regime permanente. Essa condição de contorno é imposta para o cálculo numérico. Para escoamentos reais uma pressão externa superior à pressão do fluido na saída podem resultar no descolamento da camada limite e recirculação. No entanto, considerando hiperbolicidade no campo de escoamento as propriedades no interior do bocal não dependem das condições à juzante (32); deste modo, as condições neste contorno são consideradas como

$$\frac{\partial T}{\partial x_1} = 0, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x_1} = 0, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} = 0, \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial x_1} = 0. \quad (3.13)$$

Na entrada da tubeira não há variação da velocidade horizontal no contorno, tampouco velocidade vertical. Essas condições ficam descritas com

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} = 0 \quad (3.14)$$

e

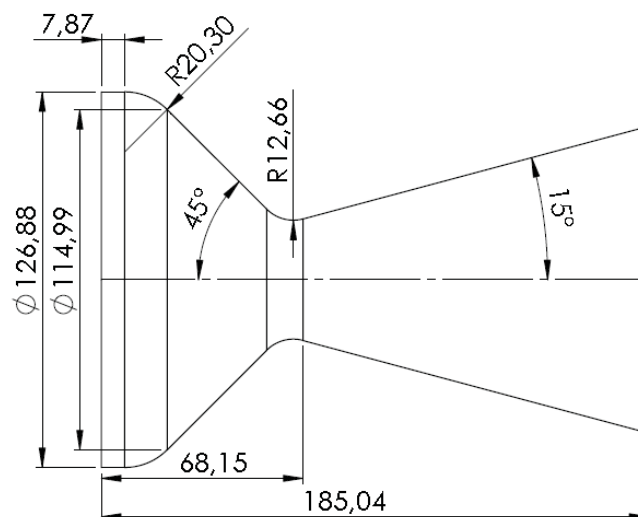
$$u_2 = 0 \quad (3.15)$$

Uma pequena velocidade associada a um número de Mach,  $Ma \simeq 1E - 6$ , paralela ao eixo de simetria é atribuída ao contorno, calculando-se as propriedades correspondentes com as equações (2.1), (2.2) e (2.3), que relacionam as propriedades com aquelas na condição de estagnação.

### 3.3 Verificação e Validação

A Validação do modelo e a Verificação dos códigos foram realizados com a geometria e dados experimentais de (4), em cujo trabalho são disponibilizados valores experimentais da pressão estática na parede da tubeira, do coeficiente de descarga e do coeficiente de empuxo. A geometria da tubeira com suas cotas está representada na FIGURA 6,

FIGURA 6 – GEOMETRIA DO BOCAL UTILIZADO NA VERIFICAÇÃO



FONTE: o autor (2020). Cotas em [mm].

Para se estimar a ordem aparente  $p_u$ , são necessárias as soluções em no mínimo 3 malhas. Se  $q_{i+1} = h_{i+1}/h_i$ ,  $i \in \{1, 2, 3, 4\}$  é a razão de refino,  $i = 1$  sendo a malha mais

grosseira e  $i = 4$  a malha mais refinada, então a ordem aparente é dada pela equação 2.30, válida para razões de refino,  $q_j$ , iguais para qualquer  $j$ .

O parâmetro  $h$  é algum valor característico da malha. No caso de malhas bidimensionais toma-se  $h = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}}$  em (15). S neste caso é a área da malha e  $N_x$  é o número de volumes no eixo coordenado  $x$  e  $N_y$  é o número de volumes no eixo coordenado  $y$  para uma malha estruturada. Para se determinar a estimativa do erro foi utilizado o estimador GCI (44).

No software SU2 foram testados dois esquemas advectivos para a resolução da equação de Euler, o HLLC sem limitador de fluxo de ordem de convergência teórica,  $p_L$ , igual a 1, e o HLLC com MUSCLE-Hancock com o limitador de fluxo de Ventakrishnan, de ordem teórica 2. As duas configurações são referenciadas como **SU2-1** e **SU2-2**, respectivamente.

A inicialização dos campos de pressão, temperatura e velocidade foi obtida com um escoamento potencial, obtendo-se campos conservativos. Esse procedimento permitiu reduzir o tempo computacional para se atingir o critério de convergência ( $RMSE_\rho \leq 10^{-9}$ ). A inicialização do algoritmo com campos nulos ou não-conservativos comprometia a convergência, quer seja pela equação de estado utilizada, quer seja pela aproximação inicial das velocidades das ondas.

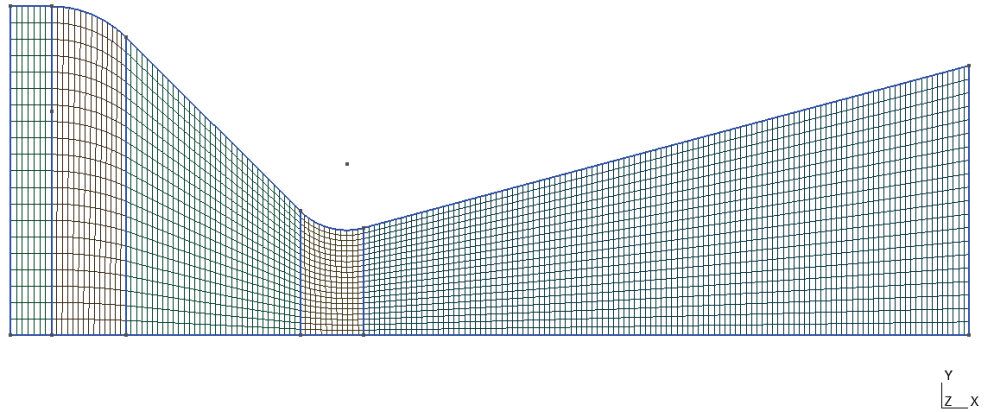
No OpenFoam foi utilizado o algoritmo PIMPLE com adaptações para compressibilidade, pseudo-transiente, isto é, o tempo foi utilizado somente como parâmetro de relaxação. Este algoritmo é implementado no solver *rhoPimpleFoam*, declarado no arquivo *ControlDict* e a discretização temporal é declarada como *localEuler* em *fvSchemes*. A convergência não foi alcançada utilizando-se o solver *rhoSimpleFoam*, com regime permanente. Foram testados o esquema LUDS para as propriedades e Van Leer para os fluxos nas faces, ambos com ordem de convergência teórica 2 e doravante referenciados como **OF-1** e **OF-2**, respectivamente.

As 4 malhas utilizadas na Verificação foram geradas com o utilitário GMSH, com elementos quadrangulares, tal qual a FIGURA 7. As malhas utilizadas na verificação e validação foram obtidas por meio de razão de refino 2 a partir da malha 180x20.

Portanto, foram utilizadas as malhas 180x20, 360x40, 720x80 e 1440x160, e para cada umas dessa malhas a não-ortogonalidade foi avaliada. Em especial para o método empregado no OpenFoam, quando este parâmetro é maior do que aproximadamente  $20^\circ$  deve ser empregada correção de não-ortogonalidade. Isto é feito acrescentando-se *nNonOrthogonalCorrectors* não nulo no dicionário do algoritmo PIMPLE em *fvSolution*. No caso da razão de aspecto, valores elevados não costumam ser fator impeditivo de convergência, mas podem deixar o processo mais lento.

O OpenFOAM trabalha com axissimetria bidimensional de um modo não trivial. Uma forma é rotacionar o perfil axissimétrico de um ângulo de  $5^\circ$ , de tal modo que sólido

FIGURA 7 – MALHA 180X20 PARA A GEOMETRIA CÔNICA



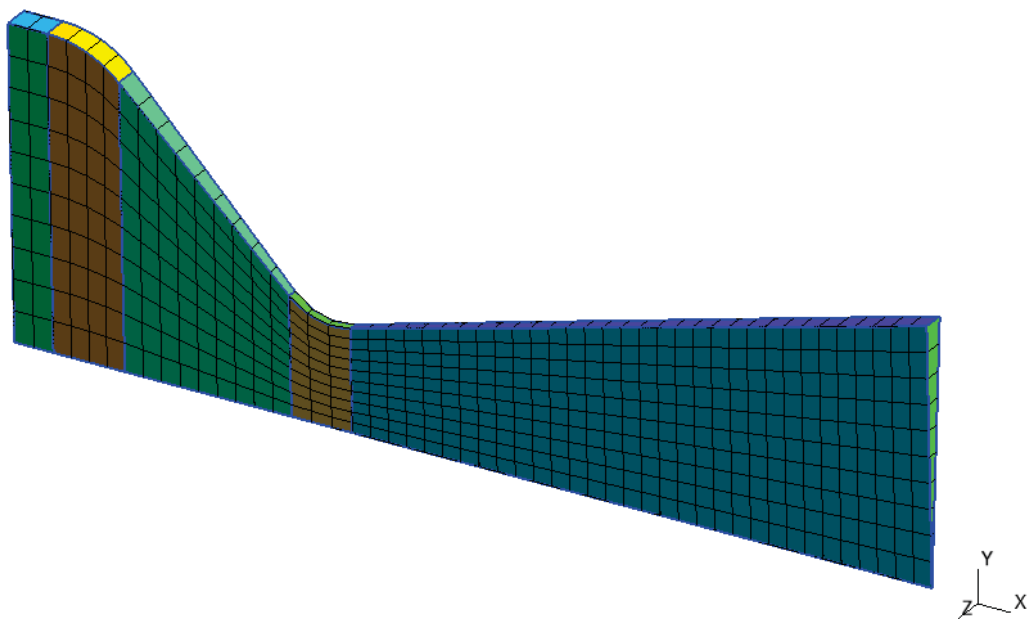
FONTE: o autor (2020).

TABELA 1 – QUALIDADE DA MALHA

| Não-Ortogonalidade | máx Razão de aspecto | máx Distorção |
|--------------------|----------------------|---------------|
| máx 44,15 °        | 23,04                | 1,71          |
| médio 14,8 °       |                      |               |

gerado fique simétrico em relação ao plano x-y, isto é, aplicando-se uma rotação de 2,5 ° em cada direção (FIGURA 8). Este valor de 2,5 ° é o valor recomendado pela documentação para este fim.

FIGURA 8 – CUNHA DE 2,5° PARA MODELOS AXISSIMÉTRICOS NO OPENFOAM



FONTE: o autor (2020).

A vazão mássica foi calculada com integração numérica via método dos trapézios na saída do bocal, que então foi usada para o cálculo do coeficiente de descarga. Compara-se o coeficiente de descarga numérico com o coeficiente de descarga experimental na verificação da variável global, e as soluções pontuais da pressão estática na parede para a verificação da variável local, ambos em relação aos valores experimentais de (4).

### 3.4 Otimização

As aproximações do coeficiente de empuxo em função das variáveis geométricas foram modeladas por redes neurais artificiais e por Processos Gaussianos. No caso do bocal cônico, ambos os métodos foram empregados. A rede neural artificial de arquitetura *Multilayer perceptron*, totalmente conectada, foi implementada com a biblioteca de aprendizagem de máquina TensorFlow e a API Keras, e a otimização foi procedida com o método de algoritmos genéticos.

O conjunto de dados para a geometria cônica é composta por 120 simulações de CFD, com 40 níveis para o fator  $\alpha$  e 3 níveis para o fator  $R_3$ , conforme as metodologias expostas na revisão bibliográfica. No caso da geometria parabólica, utilizou-se somente o método de otimização Bayesiana. Foi utilizado um conjunto de dados com 16 coeficientes de empuxo, obtido por simulação computacional para 4 níveis para o fator  $\alpha$  e 4 níveis para o fator  $R_3$  para construir a aproximação inicial.

A rede neural artificial é treinada com um número de simulações computacionais suficiente para se obter um erro de validação inferior à  $1e-3$ , quando então é integrada ao algoritmo genético cuja tarefa é maximizar a sua resposta. O número de nós e de camadas foi selecionado dentro de um conjunto de opções segundo o melhor resultado na validação cruzada. Foram utilizadas 2 camadas densas com 12 nós cada, com função de ativação Relu. Na otimização com o algoritmo genético foram utilizadas 10 gerações, taxa de mutação de 3 %,  $n(\Omega) = 7$ , sorteio aleatório por roleta.

No procedimento por otimização Bayesiana o modelo é construído com um número menor de simulações para se obter uma aproximação inicial. As próximas condições geométricas a serem simuladas são definidas sequencialmente com otimização Bayesiana. Em suma, os métodos diferem entre si no sentido de que no primeiro método proposto a superfície de resposta é aproximada uma única vez, enquanto que no segundo a superfície é atualizada sequencialmente com amostragens orientadas pela incerteza  $\sigma$  em regiões ainda não exploradas e pela informação das regiões com algum ponto maximizador em cada iteração. Como visto na fundamentação, a prioridade com que estas informações são utilizadas é descrita pela função de aquisição, que neste trabalho é descrita pela equação (2.43).

As curvas de empuxo em função de parâmetros da geometria estão disponíveis em

vários trabalhos e são reconhecidamente suaves de modo que uma interpolação polinomial seria suficiente para aproximá-la. Entretanto, para os fins a que se propõe este trabalho, o fenômeno é modelado com métodos *black-box*, que encontram maior utilidade em problemas com comportamentos altamente complexos (irregulares). Para verificação e comparação das soluções obtidas com os métodos estudados a superfície foi aproximada por *splines* cúbicas, procedendo com a otimização por métodos de gradiente, como um caso de otimização convexa clássico.

A informação da suavidade da curva de empuxo é utilizada *a priori* na escolha da função de covariância, o Kernel RBF no Processo Gaussiano. Desse modo, para o processo sequencial de otimização com otimização Bayesiana tem-se o seguinte algoritmo:

- 0) Selecionar uma função de covariância e o algoritmo de otimização para o processo gaussiano;
- 1) obter uma superfície de resposta inicial para o coeficiente de empuxo, simulando por CFD algumas configurações. Essas configurações podem ser selecionadas ao acaso, considerando uma distribuição uniforme, ou dividindo-se igualmente o espaço de busca;
- 2) com o processo gaussiano determinado, obter a próxima configuração a ser simulada pela função de aquisição;
- 3) simular via CFD a configuração obtida anteriormente e verificar se alguma condição de parada foi alcançada (avaliar a variação do valor ótimo ou a variância do processo gaussiano). Em caso negativo, atualizar o processo gaussiano com essa nova observação, retornando ao item 1.

Os métodos de aprendizado de máquina foram implementados com a linguagem Python, com as bibliotecas scikit-learn, TensorFlow, Keras e Scipy, bem como módulos nativos para interação com o sistema operacional. Todos os modelos são validados com *LOO* e tem a normalidade da dispersão dos resíduos verificada.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

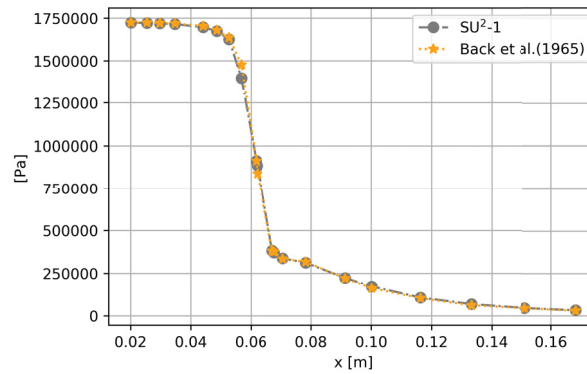
A primeira seção deste capítulo é destinada aos resultados da verificação e validação do modelo numérico. Na segunda seção são apresentados os resultados obtidos com os procedimentos de otimização, isto é, as configurações ótimas e os coeficientes de empuxo associados e, por fim, as análises desses resultados.

### 4.1 Verificação e Validação

#### 4.1.1 SU2

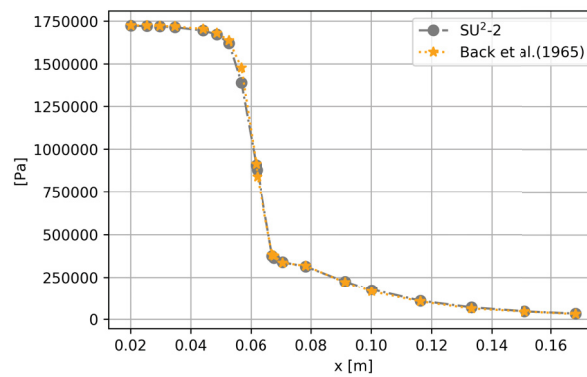
Os resultados numéricos da malha mais refinada obtidos com o SU2 e a pressão estática experimental estão dispostos nas FIGURA 9 e FIGURA 10.

FIGURA 9 – VALORES EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS, SU2-1



FONTE: O autor (2020).

FIGURA 10 – VALORES EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS, SU2-2



FONTE: O autor (2020).

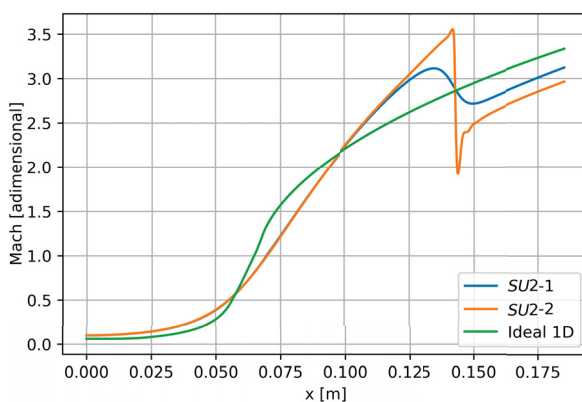
TABELA 2 – SOLUÇÕES NUMÉRICAS COM O SU2

| $C_d$ Experimental (Back et al.) : 0,977044 ± 0,00192 (Confiabilidade de 95%) |                        |                    |                     |                      |
|---|------------------------|--------------------|---------------------|----------------------|
| Esquema   | Malha $n_x \times n_y$ | $C_d$              | $p_u$               | $U_{GCI}(C_s = 1,3)$ |
| SU2-1   | 180x20                 | 0.9797525823860607 | Não se aplica       | Não se aplica        |
|   | 360x40                 | 0,9786559326135399 | Não se aplica       | Não se aplica        |
|   | 720x80                 | 0,9796071540493299 | 0,20524972663858637 | -0,00897             |
|   | 1440x160               | 0,9801480669585516 | 0,8143848978918506  | -0,00157             |
| SU2-2   | 180x20                 | 0.981926837776716  | Não se aplica       | Não se aplica        |
|   | 360x40                 | 0,980904881312468  | Não se aplica       | Não se aplica        |
|   | 720x80                 | 0,9807581518752168 | 2,800103495711183   | -0,000367            |
|   | 1440x160               | 0,9806402593832384 | 0,3156864946370295  | -0,000749            |

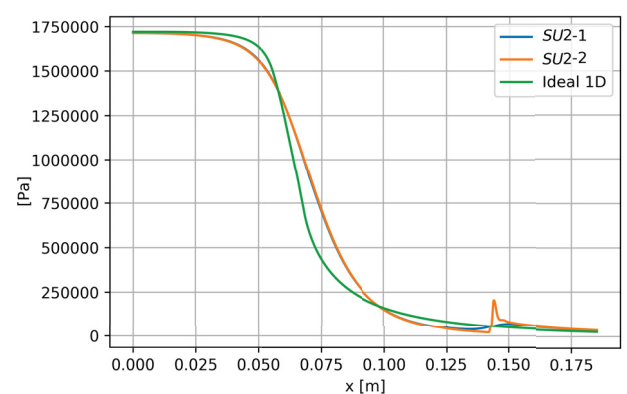
O erro da solução numérica de SU2-1 para a variável global  $C_d$  em relação ao valor experimental é de 0,32%, e de 0,37% para SU2-2, situando-se muito próximo do erro padrão com uma confiabilidade de 99,9 % (0,00314) para o experimento.

Para SU2-2, constata-se que o máximo erro em relação à solução experimental foi de 5,94% contra 5,35% para SU2-1 para a variável local analisada, a pressão estática na parede do bocal. A média dos erros para SU2-2 foi 10,9% maior em relação a SU2-1.

O esquema de ordem 2, SU2-2, resultou em melhor resolução das descontinuidades no escoamento. Uma vez que esta solução se apresenta mais bem convergida, a intensidade da irreversibilidade introduzida pelo choque se expressa no menor número de Mach na saída. A falsa difusão causada pelo esquema de primeira ordem contribui para um aumento artificial do campo de pressão e atenuação do campo de velocidades, no entanto, essa irreversibilidade se mostra menos crítica do que aquela atribuída ao fenômeno de choque, explicando a menor intensidade do campo de Mach para SU2-2 na saída.



(a) Número de Mach na linha de simetria

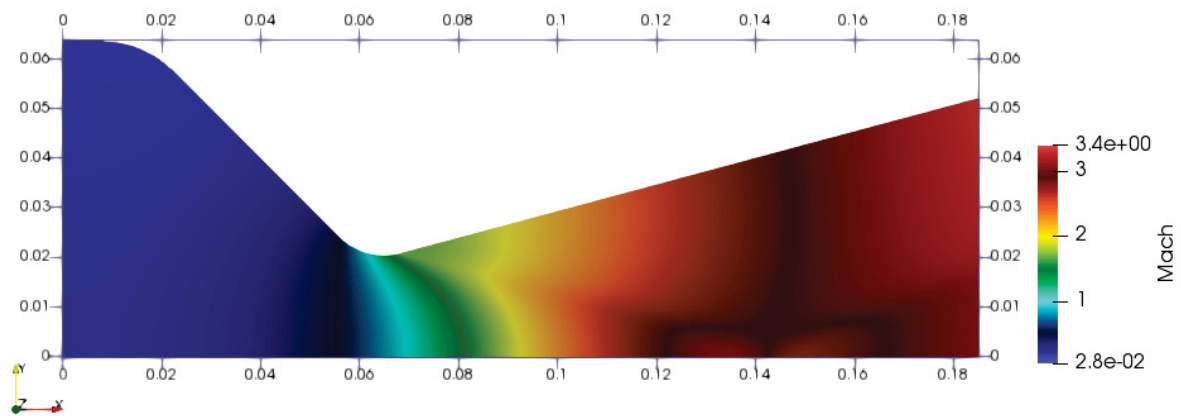


(b) Pressão estática na linha de simetria

FIGURA 11 – SOLUÇÃO NUMÉRICNA NA LINHA DE SIMETRIA COM OSCILAÇÃO NÃO-FÍSICA.

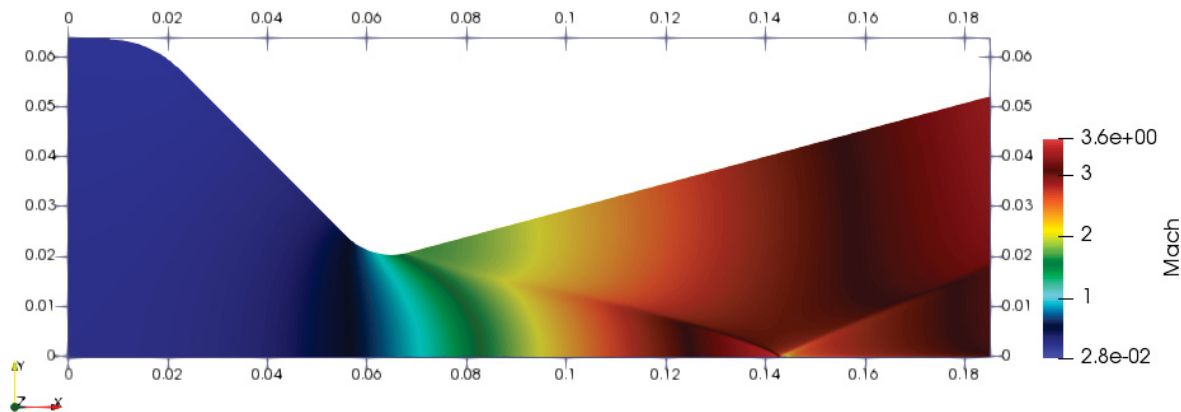
Pela FIGURA 12, observa-se a presença da onda de choque em SU2-1, cuja frente se propaga a partir do início da seção cônica do bocal. Na linha de simetria observa-se a reflexão da mesma, fenômeno que também pode ser compreendido como a refração das ondas propagadas simetricamente no bocal. Desse modo, constata-se que o método numérico capturou o fenômeno do escoamento, apesar da baixa resolução devida a uma falsa difusão esperada pela sua ordem assintótica teórica. A solução com SU2-2, FIGURA 13, apresenta maior resolução na captura da onda de choque.

FIGURA 12 – CAMPO DO NÚMERO DE MACH NO BOCAL. SU2-1



Solução com menor resolução. FONTE: O autor (2020).

FIGURA 13 – CAMPO DO NÚMERO DE MACH NO BOCAL. SU2-2



FONTE: O autor (2020).

O escoamento real no interior do bocal não é invíscido, apresenta difusividade térmica e é caloricamente imperfeito. Os efeitos destes fatores desconsiderados na modelagem são compensados pela falsa difusão do modelo de ordem 1, cuja solução numérica concorda com os dados experimentais da pressão estática com um menor erro do que o modelo de ordem 2. Na linha de simetria a posição da região de sobreposição das ondas de choque concorda com a solução numérica do Mach2D (15).

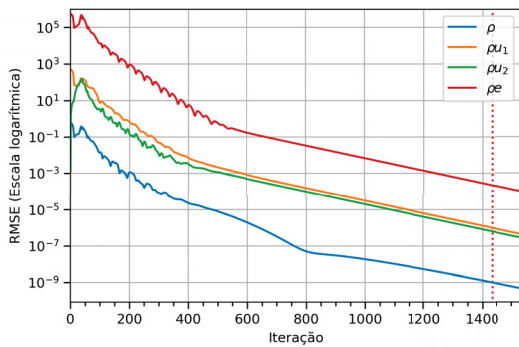
As simulações foram realizadas em um computador com processador Intel Core

i3, frequência de clock de 1,7GHz e 4GB de memória RAM. Para o esquema SU2-1, e com critério de convergência sendo o resíduo da massa específica inferior à  $10^{-9}$ , o tempo computacional para cada malha está exposto na TABELA 3 a seguir.

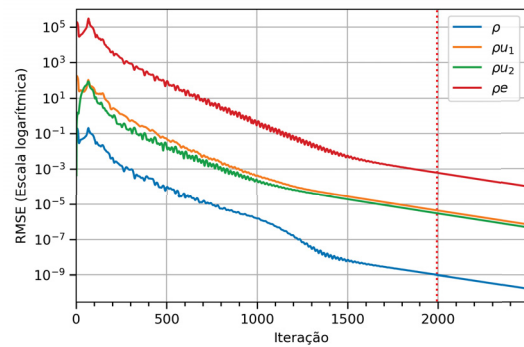
TABELA 3 – TEMPO COMPUTACIONAL POR MALHA

|              | Malha    | Tempo de simulação (h:min:s) |
|--------------|----------|------------------------------|
| <i>SU2-1</i> | 180x20   | 00:01:28                     |
|              | 360x40   | 00:09:45                     |
|              | 720x80   | 01:18:05                     |
|              | 1440x160 | 10:37:36                     |

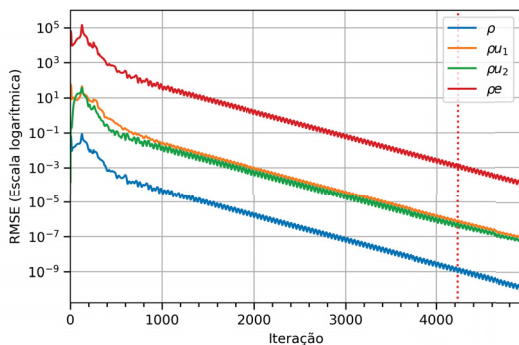
O histórico dos resíduos está disposto na Tabela 14. A linha tracejada vermelha representa a iteração na qual o resíduo da variável  $\rho$  alcança o critério de convergência.



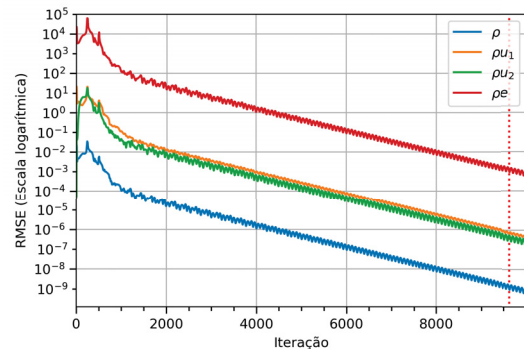
(a) Convergência residual para a malha 180x20



(b) Convergência residual para a malha 360x40



(c) Convergência residual para a malha 720x80



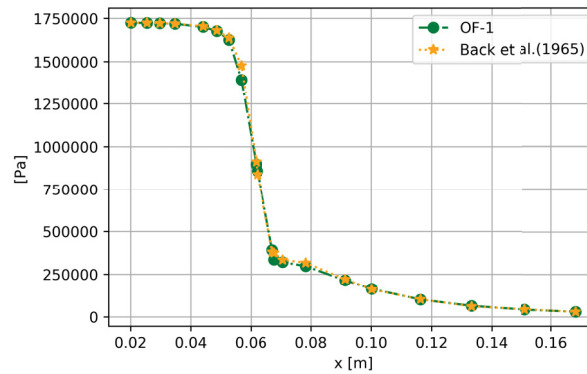
(d) Convergência residual para a malha 1440x160

FIGURA 14 – RESÍDUO DAS VARIÁVEIS MONITORADAS, SU2-1.

### 4.1.2 OpenFOAM

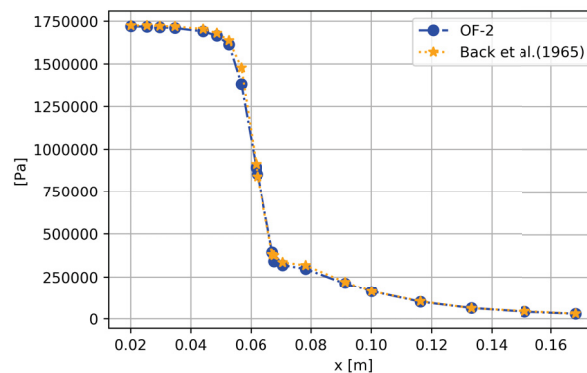
As figuras FIGURA 15 e FIGURA 16 apresentam as pressões estáticas na parede com a solução numérica obtida com o OpenFOAM e os respectivos valores experimentais. A estimativa do erro numérico está disposta na tabela 4.

FIGURA 15 – VALORES EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS, OF-1



FONTE: o autor (2020).

FIGURA 16 – VALORES EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS, OF-2



FONTE: o autor (2020).

TABELA 4 – SOLUÇÃO NUMÉRICA COM O OPENFOAM

| Esquema | Malha $n_x \times n_y$ | $C_d$              | $p_u$              | $U_{GCI}(C_s = 1,3)$ |
|---------|------------------------|--------------------|--------------------|----------------------|
| OF-1    | 180x20                 | 1,020262193999684  | Não se aplica      | Não se aplica        |
|         | 360x40                 | 1,0041697175930453 | Não se aplica      | Não se aplica        |
|         | 720x80                 | 0,9995059123349277 | 1,7868068999723914 | -0,00854             |
|         | 1440x160               | 0,9973734416777574 | 1,1289816584389525 | -0,00511             |
| OF-2    | 180x20                 | 0,9860315015022948 | Não se aplica      | Não se aplica        |
|         | 360x40                 | 0,9877311333894132 | Não se aplica      | Não se aplica        |
|         | 720x80                 | 0,9884143145159826 | 1,3148822906895004 | -0,00148             |
|         | 1440x160               | 0,9886017794668847 | 1,8656472303451908 | -0,000336            |

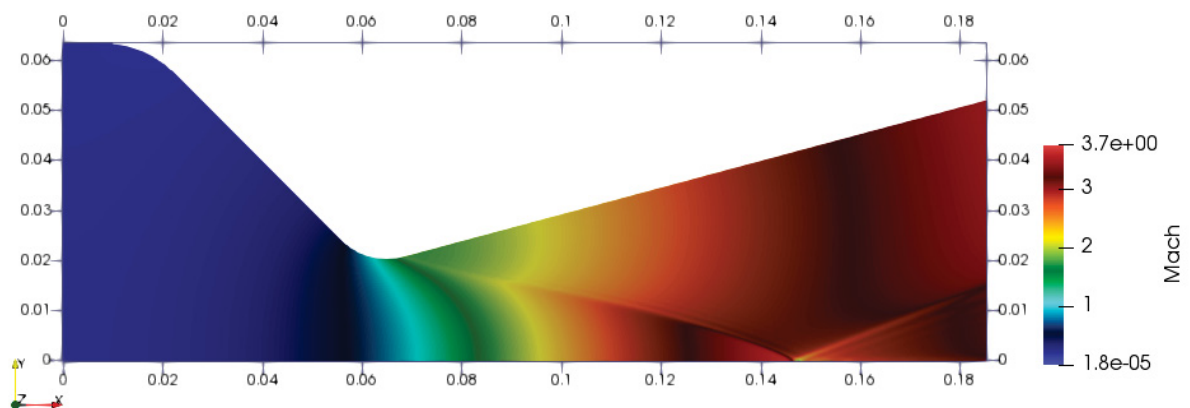
Novamente, observa-se erro maior para a solução mais bem convergida, OF-2. O erro médio da pressão estática para OF-2 foi cerca de 15,56% maior do que OF-1, com erros máximos para a variável local, respectivamente, de 6,5% e 5,6%.

O erro da variável global  $C_d$  foi de 2,08% para OF-1 e de 1,18% para OF-2 em relação ao seu valor experimental. Erro superior ao aferido com SU2-1 e SU2-2.

OF-1 apesar de ser igualmente de ordem 2 se mostrou mais difusivo do que OF-2, o que conferiu um comportamento não-oscilatório da solução. O módulo do erro da solução de OF-1 se mostrou 1 ordem de grandeza maior em relação ao módulo do erro de OF-2, demonstrando que OF-2 se apresenta mais bem convergida para a mesma malha mais refinada.

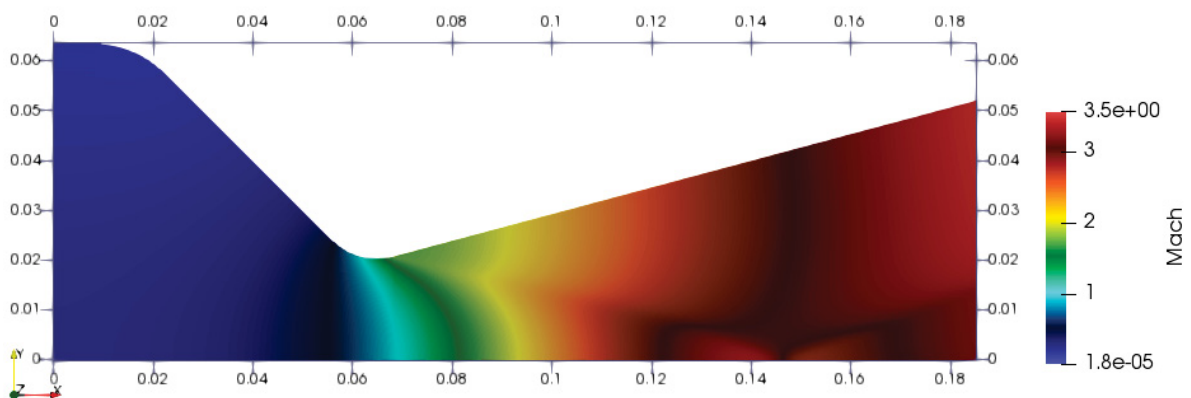
Observa-se a captura da descontinuidade com o surgimento de oscilação para OF-2. Esta oscilação não-física já foi reportada em (58) para esquemas TVD com métodos de acoplamento.

FIGURA 17 – CAMPO DO NÚMERO DE MACH NO BOCAL. OF-1

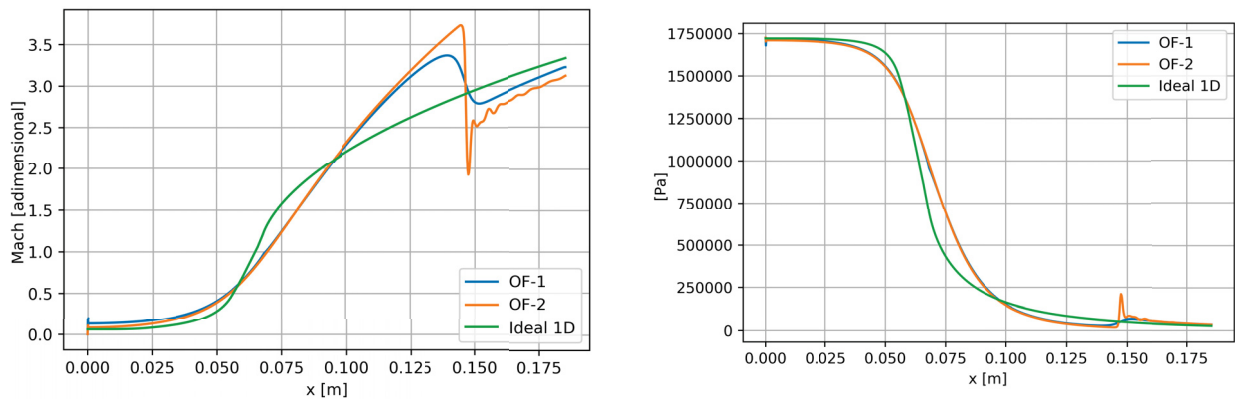


Solução com oscilação não física. FONTE: O autor (2020).

FIGURA 18 – CAMPO DO NÚMERO DE MACH NO BOCAL. OF-2



FONTE: O autor (2020).



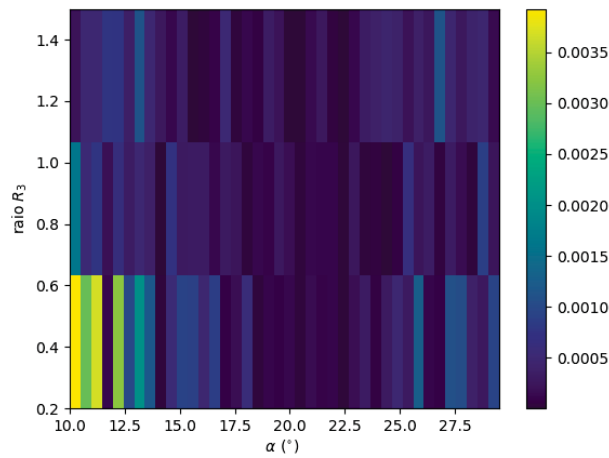
(a) Número de Mach na linha de simetria (b) Pressão estática na linha de simetria

FIGURA 19 – SOLUÇÃO NUMÉRICA NA LINHA DE SIMETRIA

### 4.2 Otimização dos perfis

Em FIGURA 20, FIGURA 21 e FIGURA 22 são apresentados os valores RMSE da validação cruzada com o método *leave-one-out* (LOO) para cada ponto do conjunto de simulações numéricas, para a geometria cônica e para a geometria parabólica. Na tabela 5 estão dispostos os erros para cada modelo e para cada geometria considerada.

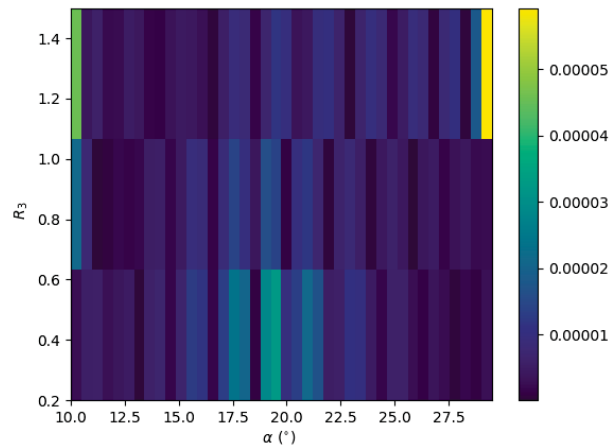
FIGURA 20 – NORMA  $L_1$  DO ERRO NA VALIDAÇÃO CRUZADA PARA A ANN



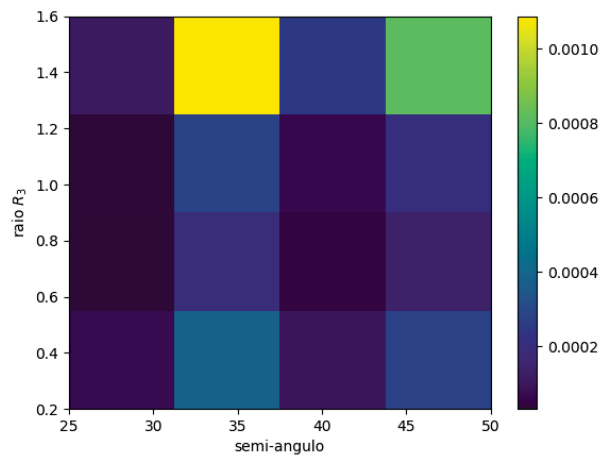
FONTE: O autor (2020).

TABELA 5 – VALIDAÇÃO CRUZADA - LOO

| Validação Cruzada |        |             |                        |
|-------------------|--------|-------------|------------------------|
|                   | Modelo | RMSE        | MAE                    |
| Cônica            | ANN    | 0,80943E-03 | 4,6178459532479437E-04 |
|                   | GP     | 0,11069E-04 | 7,271544181702838E-06  |
| Parabólica        | GP     | 3,83367E-04 | 2,55928E-04            |

FIGURA 21 – NORMA  $L_1$  DO ERRO NA VALIDAÇÃO CRUZADA PARA O GP

FONTE: O autor (2020).

FIGURA 22 – NORMA  $L_1$  DO ERRO NA VALIDAÇÃO CRUZADA PARA A GP - GEOMETRIA PARABÓLICA

FONTE: O autor (2020).

Constata-se que para o caso da geometria cônica, o RMSE é quase duas ordens maior para o modelo com redes neurais, mesmo tendo sido treinado com uma amostra significativamente maior. No procedimento de otimização combinatorial da arquitetura, esta foi a configuração de menor RMSE dentre as arquiteturas avaliadas. Nota-se que a função custo do modelo é uma função caixa-preta, e a otimização Bayesiana pode ser aplicada para a determinação do seu minimizador global (59) como forma alternativa.

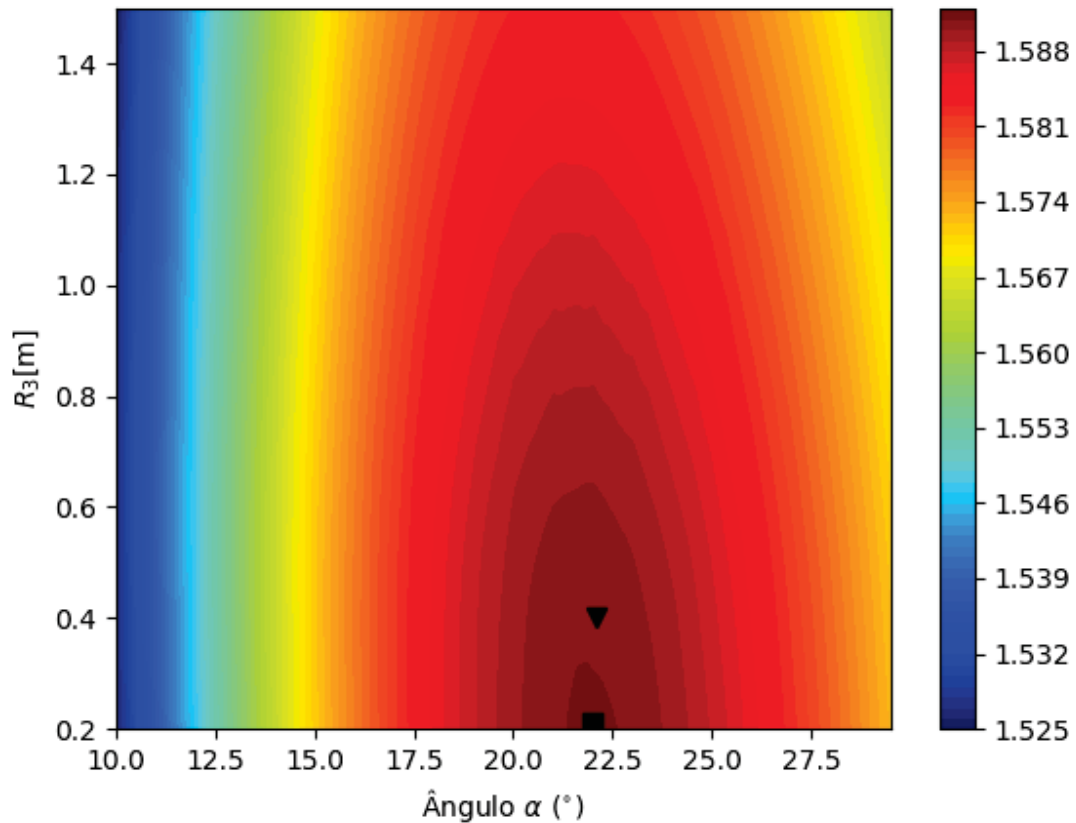
Para a geometria cônica, os métodos divergiram quanto ao valor encontrado para a variável  $R_3$ , enquanto os semi-ângulos  $\alpha$  se apresentaram próximos ( $22,0^\circ$ ). Os coeficientes de empuxo avaliados nesses maximizadores também apresentam valores próximos, **com diferença de ordem inferior à ordem do erro estimado** dos modelos por validação-cruzada.

Observa-se que a variável  $R_3$  não apresenta influência significativa no coeficiente

TABELA 6 – MAXIMIZADORES DO EMPUXO PARA CADA MÉTODO

|                    | OB com GP | AG com ANN |
|--------------------|-----------|------------|
| $\alpha(^{\circ})$ | 22,0      | 22,073     |
| $R_3[m]$           | 0,201     | 0,401      |

FIGURA 23 – COEFICIENTE DE EMPUXO - GEOMETRIA CÔNICA



▼: solução com AG-ANN; ■: solução com OB-GP.

FONTE: O autor (2020).

de empuxo, efeito que é dominado pela influência do parâmetro  $\alpha$ . Pode-se conferir isso graficamente pelo domínio bidimensional, no qual para cada  $\alpha$  fixado, tem-se uma pequena variação do coeficiente de empuxo em função de  $R_3$ . A análise dos pesos  $w_{ij}^l$  do modelo por redes neurais artificiais treinado permite essa conclusão, observando-se o comportamento dos pesos no grafo correspondente a cada variável de entrada (60).

Neste caso, a principal influência na variação de  $R_3$  está na variação do comprimento do divergente que, ao se modificar esta variável, impõe-se uma modificação no seu comprimento. No entanto, esta variação é pequena para o intervalo de  $R_3$  considerado, observando-se pouca alteração no coeficiente de empuxo. O ângulo  $\alpha$  exerce maior influência pois impacta diretamente na quantidade de movimento do fluido.

Utilizando um método quase-newton com interpolação por splines cúbicas para

a verificação da solução, o valor máximo para o coeficiente de empuxo foi superior na ordem de  $1\text{E-}4$ , aferido em  $21,9^\circ$  e em  $R_3$  igual a  $0,2$  [m]. Esta diferença reside em ineficiências dos métodos de busca nos procedimentos de otimização. Observa-se que na vizinhança de  $22,5^\circ \pm 2,5^\circ$ , a aproximação situa-se num aberto de raio  $1\text{E-}3$ , isto é,  $|f(x) - f(y)| \leq 0,001, \forall x, y \in [20, 25]$ . Logo,  $|f(x) - f(y)| \leq L|x - y|$  para  $L = 0,0005$  e  $x, y \in [20, 25]$ . Seja  $f(x^*) = \tau$  o máximo valor no intervalo e, portanto,  $|f(x) - \tau| \leq L|x - x^*|$ . Para  $|x - x^*| \leq \delta$ , com  $\delta$  suficientemente pequeno, a função utilidade e, conseqüentemente, a melhoria esperada se reduzem a valores inferiores a ordem do erro de predição. Isto impede o algoritmo de prosseguir na busca por maximizadores da função  $\mu$ . Como este é o intervalo que contém o máximo global, a função utilidade também permanecerá invariável para qualquer ponto fora do intervalo.

Este comportamento localmente Lipschitziano da função no intervalo pode também estar associado à ineficiência observada com o algoritmo genético. Pela FIGURA 20, no intervalo  $[21, 24] \times [0, 2, 0, 4]$  tem-se erro entre  $0,5\text{E-}4$  e  $1,0\text{E-}3$  com o modelo por ANN, que são valores próximos de  $|f(x) - f(y)|$  para quaisquer  $x, y$  no mesmo. Logo, qualquer reamostragem nesta região pode comprometer a avaliação correta da função aptidão.

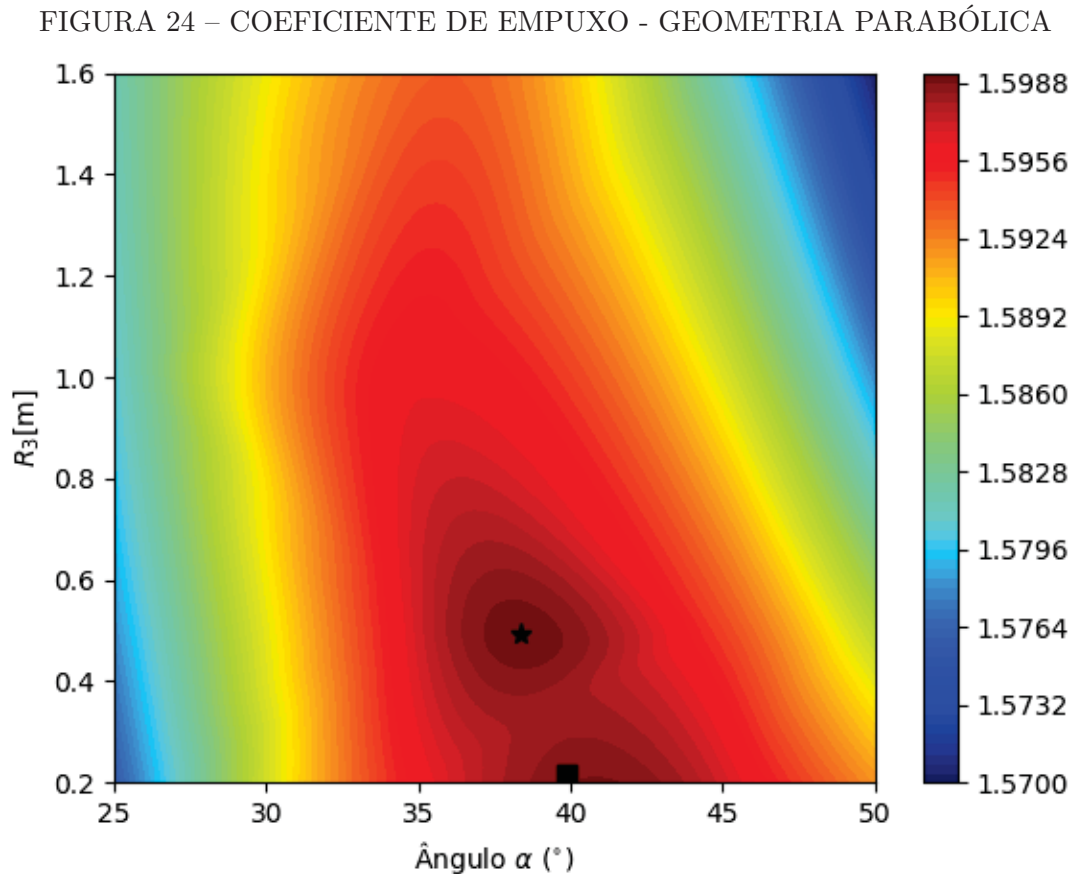
Para a geometria parabólica, com poucas iterações o algoritmo encontrou os maximizadores. Entretanto, reitera-se que o comportamento suave do empuxo no intervalo considerado, bem como o fato de ser convexa neste intervalo, foram condições favoráveis para o algoritmo por  $\mathcal{GP}$  em termos de número de simulações necessárias. Obteve-se  $\alpha = 39,9^\circ$  e  $R_3 = 0,206$  [m] para o perfil parabólico. Observa-se pela FIGURA 24 dois maximizadores locais, com diferenças pequenas entre os máximos. O outro maximizador situa-se em  $\alpha = 38,357^\circ$  e  $R_3 = 0,4886$ , no entanto, os coeficientes de empuxo nesses pontos diferem na ordem de  $10^{-4}$ .

Comparando o empuxo para as geometrias otimizadas com o empuxo sob condições ideais, o valor encontrado para a geometria cônica (1,591) foi de  $15,28\%$  inferior ao empuxo ideal, enquanto que para a geometria parabólica o coeficiente de empuxo (1,599) foi cerca de  $14,85\%$  inferior ao ideal e  $0,5\%$  superior ao coeficiente de empuxo do perfil cônico otimizado, conforme a TABELA 7.

TABELA 7 – RESULTADOS

| $C_{Back} = 1,5762390836963627 \pm 0,0009865806293122643$ |                              |                         |                                 |
|---|------------------------------|-------------------------|---------------------------------|
| Perfil  | $\Delta C_f / C_{ideal}(\%)$ | $\Delta C_f / C_{Back}$ | $C_f$                           |
| <i>Cônica</i>   | $-15,28\%$                   | $0,936\%$               | $1,591 \pm 0,0003834^\circ$     |
| <i>Parabólica</i>   | $-14,85\%$                   | $1,4503\%$              | $1,599 \pm 0,11069e - 04^\circ$ |

Comparando-se com os resultados de (13), observa-se que os valores encontrados foram inferiores. Isso é parcialmente explicado pelo diferente perfil do convergente utilizado



■: resultado com OB-GP; ★: segundo maximizador.

FONTE: O autor (2020).

neste trabalho. Conforme demonstra-se em (14), a configuração do convergente pode impactar em até 0,6 % para determinada razão de raios. Além disso, o comprimento da seção divergente utilizada em (13) é cerca de 8,56 vezes maior. Nota-se que o ângulo de inclinação obtido para o divergente cônico é equivalente aos resultados obtidos em (12), trabalho que também utilizou malhas menos refinadas do que em (13). É interessante notar que o coeficiente de empuxo pode se tornar malha-dependente, ocorrendo o deslocamento da superfície de resposta do coeficiente de empuxo. A sua construção por soluções com malhas grosseiras pode apresentar diferença em relação àquela que seria obtida com uma malha mais refinada, comprometendo a localização do verdadeiro ponto maximizador.

Em relação ao coeficiente de empuxo calculado com a configuração original de ângulo de  $15^\circ$ , o perfil cônico otimizado apresentou um aumento de 0,936 %. O bocal parabólico apresentou um incremento de 1,4503 % no coeficiente de empuxo.

## 5 CONCLUSÃO

### 5.1 Constatações gerais

Para este problema em específico, a otimização Bayesiana com processo Gaussiano se mostrou um procedimento mais eficiente do que ao se utilizar uma aproximação com redes neurais otimizada por algoritmos genéticos.

Se com métodos clássicos de planejamento de experimentos a busca dos maximizadores é realizada com a construção iterativa de hipercubos na aproximação da resposta, o método Bayesiano de otimização global oferece uma forma eficiente, com a substituição da função caixa-preta a ser otimizada por uma função de menor custo e com um procedimento de busca que visa a conciliar a exploração de regiões de grande incerteza com a continuidade da busca em regiões com grande probabilidade de conter o maximizador global.

A regressão com processos estocásticos, como o processo Gaussiano, fornece uma estimativa da incerteza da resposta do modelo, o que este algoritmo de ANN não o faz. O problema de se determinar uma forma funcional para a curva é substituído pela inferência do comportamento da resposta, expresso pela escolha da função de covariância no método Bayesiano. Outro ponto favorável ao método Bayesiano é a sua fundamentação matemática, enquanto redes neurais artificiais, bem como algoritmos genéticos, ainda dependem de meta-heurísticas.

No método com ANN, a regressão depende da escolha de diversos hiper-parâmetros que pouco dizem a respeito do comportamento do fenômeno, resumindo-se a um procedimento de minimização do erro de regressão, sem a incorporação da intuição sobre o comportamento do fenômeno estudado.

Feitas essas considerações, expõe-se a seguir algumas contribuições deste trabalho para a área de otimização de bocais e CFD:

- foi realizada a verificação de dois softwares de CFD de código livre, OpenFOAM e SU2, para o problema de dinâmica de gases com presença de onda de choque;
- com os programas foi validado o modelo considerado invíscido, compressível, termicamente perfeito para o escoamento no interior do bocal;
- dois métodos de otimização e de aprendizado de máquina foram estudados, norteados algumas ineficiências das suas implementações com as interfaces de programação de aplicações (API) disponíveis em Python;
- utilizou-se uma abordagem integrada do método Bayesiano com a avaliação direta das respostas para os pontos aferidos pela função de aquisição por meio de simulação com CFD para malhas não muito refinadas;

- implementou-se um algoritmo com potencial aplicação em projetos ótimos utilizando simulação e aprendizado de máquina.

Quando o fenômeno não é bem comportado, a determinação do máximo (mínimo) global num domínio com muitos máximos (mínimos) locais pode gerar certas dificuldades que suscitam o uso dos métodos de otimização global eficiente. Assim, este trabalho também buscou integrar os métodos estatísticos e de aprendizado de máquina aos projetos em engenharia, provendo um estudo metodológico da sua aplicação no contexto do projeto ótimo do divergente de tubeiras de motores-foguete.

## 5.2 Sugestões de Trabalhos Futuros

As técnicas de aprendizado de máquina são uma versátil ferramenta com várias potenciais aplicações em CFD, conforme constata-se na revisão bibliográfica. No âmbito dos estudos fenomenológicos em fluidos, é instigante a aplicação de redes neurais artificiais na análise de componentes principais de escoamentos turbulentos no interior de bocais. Especificamente na identificação de características do escoamento que podem ter influência significativa na otimização dos bocais.

Outras aplicações, de âmbito estritamente numérico tem sido propostas, como a utilização de redes neurais artificiais na determinação da posição da formação de ondas de choque e na redução de erros numéricos. É possível obter soluções aproximadas para EDPs com Redes Neurais Artificiais, pela abordagem de aprendizado não supervisionado. A norma do erro do modelo em regiões do domínio com grandes gradientes ou com descontinuidade tende a ser maior neste caso. Esta informação pode ser utilizada na implementação de algoritmos para refino local de malhas na captura de descontinuidades em escoamentos hiperbólicos.

Por fim, sugerem-se estudos sobre os métodos de redução de dimensionalidade com aprendizado de máquina. Conhecidos como modelos de ordem reduzida (MOR), os mesmos encontram potencial aplicação em *Digital Twins* pela eficiência com que solucionam problemas computacionais complexos. No entanto, ainda observam-se dificuldades numéricas relacionadas à convergência quando aplicados com abordagem indireta, isto é, aplicando-se a redução de dimensionalidade no sistema de equações da EDP, em problemas não-lineares hiperbólicos, tal qual o escoamento deste trabalho.

## REFERÊNCIAS

- 1 RAO, G. V. R. Exhaust nozzle contour for optimum thrust. p. 377–382, 1958. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 20.
- 2 FERZIGER, J.; PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2001. v. 1. ISBN 9783540420743. Citado 3 vezes nas páginas 17, 30 e 33.
- 3 ASME. Standard for verification and validation in computational fluid dynamics and heat transfer. *ASME V and V*, v. 20, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 38.
- 4 BACK, L. H.; MASSIER, P. F.; GIER, H. L. Comparison of measured and predicted flows through conical supersonic nozzles, with emphasis on the transonic. *AIAA Journal*, v. 3, n. 9, p. 1606–1614, 1965. Citado 5 vezes nas páginas 17, 21, 48, 50 e 53.
- 5 ALLMAN, J. G.; HOFFMAN, J. D. Design of maximum thrust nozzle contours by direct optimization methods. *AIAA Journal*, v. 19, n. 6, p. 750–751, 1981. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 20.
- 6 WILLIAMS, C. K.; RASMUSSEN, C. Gaussian processes for regression. In: . [S.l.]: NIPS, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.
- 7 WEIHS, C. et al. Efficient global optimization: Motivation, variations and applications. In: . [S.l.: s.n.], 2016. Citado na página 19.
- 8 JONES, D. R.; SCHONLAU, M.; WELCH, W. J. Efficient global optimization of expensive black-box functions. *Journal of Global Optimization*, v. 13, p. 455–492, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 41.
- 9 GUDERLEY, G.; HANTSH, E. Beste formen für achtsymmetrische überschallstrahlen. *Zeits für Flugwissenschaften*, v. 3, 1955. Citado na página 20.
- 10 RAO, G. V. R. Approximation of optimum thrust nozzle contours. p. 561, 1960. Citado na página 20.
- 11 FREY, M.; MAKOWKA, K.; AICHNER, T. The tic-top nozzle: a new nozzle contouring concept. *CEAS Space J Springer*, 2016. Citado na página 20.
- 12 MORO, D. F. *Efeito da geometria do bocal divergente sobre o empuxo de motor-foguete operando no vácuo*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Paraná - UFPR, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 65.
- 13 RADTKE, J. J. *Otimização da geometria da seção divergente de tubos de motores-foguete*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná - UFPR, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 21, 64 e 65.
- 14 GERMER, E. M. *Avaliação do efeito da geometria da seção convergente em tubos de motores-foguete*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná - UFPR, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 21, 24 e 65.
- 15 ARAKI, L. K.; MARCHI, C. H. Verification and validation of numerical solutions of two-dimensional reactive flow in rocket engine nozzles. *Applied Mathematical Modelling*, n. 52, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 21, 51 e 57.

- 16 TEO, C. L. et al. A neural net approach in analyzing photograph in piv. In: *Conference Proceedings 1991 IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics*. [S.l.: s.n.], 1991. p. 1535–1538 vol.3. Citado na página 22.
- 17 MILANO, M.; KOUMOUTSAKOS, P. Neural network modeling for near wall turbulent flow. *J. Comput. Phys.*, Academic Press Professional, Inc., USA, v. 182, n. 1, p. 1–26, out. 2002. ISSN 0021-9991. Citado na página 22.
- 18 LECUN, Y. et al. Object recognition with gradient-based learning. In: *Shape, Contour and Grouping in Computer Vision*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1999. p. 319. ISBN 3540667229. Citado na página 22.
- 19 MURATA, T.; FUKAMI, K.; FUKAGATA, K. Nonlinear mode decomposition with convolutional neural networks for fluid dynamics. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 882, p. A13, 2020. Citado na página 22.
- 20 ZHAO, F. et al. Time-sequenced flow field prediction in an optical spark-ignition direct-injection engine using bidirectional recurrent neural network (bi-rnn) with long short-term memory. *Applied Thermal Engineering*, v. 173, p. 115253, 03 2020. Citado na página 22.
- 21 SHARIFI, K. et al. Computational fluid dynamics (cfD) technique to study the effects of helical wire inserts on heat transfer and pressure drop in a double pipe heat exchanger. *Applied Thermal Engineering*, v. 128, p. 898–910, 01 2018. Citado na página 22.
- 22 G MACMANUS D, C. R. Z. Low order models for transonic afterbody aerodynamic characteristics. *AIAA SciTech Forum*, p. 6–10, 2020. Citado na página 22.
- 23 ANDERSON JR., J. D. *Fundamentals of Aerodynamics*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1990. v. 1. ISBN 9783540420743. Citado na página 24.
- 24 ANDERSON JR., J. D. *Modern Compressible Flow*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1991. v. 1. ISBN 9783540420743. Citado 3 vezes nas páginas 25, 26 e 31.
- 25 SILVA, N. D. P. da. *Extrapolação de Richardson ocmpleta e repetida para escoamentos com fluido compressível*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná - UFPR, 2019. Citado na página 25.
- 26 BORGES, R. B. de R. et al. A sequel of inverse lax–wendroff high order wall boundary treatment for conservation laws. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2020. Citado na página 25.
- 27 SUTTON, O. B. G. P. *Rocket Propulsion Elements*. [S.l.]: John Wiley and Sons, Ed. 9, 2017. cap8. 1-2 p. ISBN 9783540420743. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.
- 28 LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. Fluid mechanics 2nd edition. In: . [S.l.]: MIR, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.
- 29 SPENCER, A. *Continuum Mechanics*. [S.l.]: Dover Publications, 2004. ISBN 9780486435947. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.
- 30 MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 2004. v. 2. 1-2 p. ISBN 8521613962, 9788521613961. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 33.

- 31 VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics - the finite volume method*. [S.l.]: Pearson Education, 2007. v. 2. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 33.
- 32 LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 2004. v. 2. 1-2 p. ISBN 8521613962, 9788521613961. Citado 3 vezes nas páginas 30, 31 e 49.
- 33 ROE, L. approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *J. Comput. Phys.*, v. 43, n. 1, p. 357–372, 1981. Citado na página 31.
- 34 HARTEN, A.; LAX, P. D.; LEER, B. V. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM*, v. 25, p. 35–61, 1983. Citado na página 31.
- 35 EINFELDT, B. On godunov-type methods for gas dynamics. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, v. 25, n. 2, p. 294–318, 1988. Citado na página 31.
- 36 TORO, E. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*. [S.l.]: Springer-Verlag, Ed. 3, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 31, 32 e 34.
- 37 TORO, E.; SPRUCE, M.; SPEARES, W. Restoration of the contact surface in the hll-riemann solver. *Springer-Verlag*, n. 4, p. 25–34, 1994. Citado na página 31.
- 38 BALSARA, D. S. A two-dimensional hllc riemann solver for conservation laws: Application to euler and magnetohydrodynamic flows. *Journal of Computational Physics*, v. 231, n. 22, p. 7476–7503, 2012. Citado na página 32.
- 39 BALSARA, D. S.; DUMBSER, M.; ABGRALL, R. Multidimensional hllc riemann solver for unstructured meshes - with application to euler and mhd flows. *Journal of Computational Physics*, v. 261, p. 172–208, 2014. Citado na página 33.
- 40 DARWISH, M. S.; MOUKALLED, F. Tvd schemes for unstructured grids. *International Journal of Heat and Mass transfer*, n. 46, p. 599–611, 2003. Citado na página 34.
- 41 PALACIOS, F. Stanford university unstructured SU2: An open-source integrated computational environment for multi-physics simulation and design. *AIAA SciTech*, 2013. Citado na página 35.
- 42 PALACIOS, F. Stanford university unstructured SU2: Open-source analysis and design for turbulent flows. *AIAA SciTech*, 2014. Citado na página 35.
- 43 JURETIC, F.; GOSMAN, A. D. Error analysis of the finite-volume method with respect to mesh type. *Numerical heat transfer - Part B*, v. 57, p. 414–439, 2010. Citado na página 37.
- 44 MARCHI, C. H. *Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinamica dos fluidos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC, Florianópolis, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 51.
- 45 HUBEL, D. H.; WIESEL, T. N. Receptive fields, binocular interaction and functional architecture in the cat's visual cortex. *The Journal of physiology*, Wiley-Blackwell, v. 160, n. 1, p. 106, 1962. Citado na página 39.

- 46 HAUSER, M.; RAY, A. Principles of riemannian geometry in neural networks. In: *Advances in neural information processing systems*. [S.l.: s.n.], 2017. p. 2807–2816. Citado na página 39.
- 47 KREYSZIG, E. *Differential Geometry*. [S.l.]: University of Toronto Press, 1959. Citado na página 39.
- 48 WILLIAMS, C. K.; RASMUSSEN, C. Gaussian processes for machine learning. In: . [S.l.]: MIT Press, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 41.
- 49 RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning representations by back-propagating errors. In: \_\_\_\_\_. *Neurocomputing: Foundations of Research*. Cambridge, MA, USA: MIT Press, 1988. p. 696–699. ISBN 0262010976. Citado na página 40.
- 50 HECHT; NIELSEN. Theory of the backpropagation neural network. In: *International 1989 Joint Conference on Neural Networks*. [S.l.: s.n.], 1989. p. 593–605 vol.1. Citado na página 40.
- 51 BAYDIN, A. G. et al. Automatic differentiation in machine learning: a survey. *Journal of Machine Learning Research*, v. 18, n. 153, p. 1–43, 2018. Citado na página 40.
- 52 BERTSEKAS, D. *Nonlinear Programming*. [S.l.]: Athena Scientific, 2016. (Athena scientific optimization and computation series). ISBN 9781886529052. Citado na página 40.
- 53 SHAHRIARI, B. et al. Taking the human out of the loop: A review of bayesian optimization. *Proc. IEEE*, v. 104, p. 148–175, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 41, 42 e 44.
- 54 KOHAVI; RON. A study of cross-validation and bootstrap for accuracy estimation and model selection. Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, p. 1137–1143, 1995. Citado na página 42.
- 55 CHONG, E. K. P.; ZAK, S. H. *An Introduction to Optimization*. [S.l.]: Wiley, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 44.
- 56 COLEY, D. A. *An Introduction to Genetic Algorithms for Scientists and Engineers*. [S.l.]: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 44.
- 57 MCBRIDE, B. J.; GORDON, S. D.; RENO, M. A. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. In: . [S.l.: s.n.], 1993. Nenhuma citação no texto.
- 58 SILVA, N. D. P. D. *Aplicação de esquemas numéricos em escoamentos com ondas de choque em bocais do tipo convergente-divergente*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Paraná - UFPR, 2015. Citado na página 60.
- 59 WU, J. et al. Hyperparameter optimization for machine learning models based on bayesian optimizationb. *Journal of Electronic Science and Technology*, v. 17, n. 1, p. 26 – 40, 2019. Citado na página 62.
- 60 GARSON, G. D. Interpreting neural network connection weights. *AI Expert*, v. 6, n. 4, 1991. Citado na página 63.