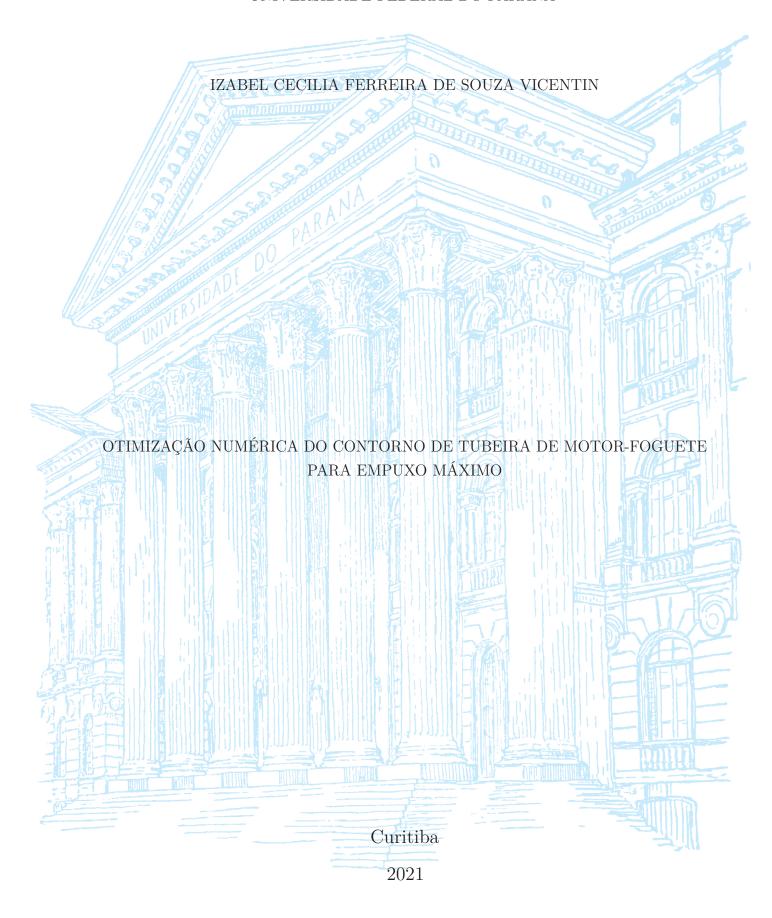
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ



IZABEL CECILIA FERREIRA DE SOUZA VICENTIN

OTIMIZAÇÃO NUMÉRICA DO CONTORNO DE TUBEIRA DE MOTOR-FOGUETE PARA EMPUXO MÁXIMO

Tese apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Doutora em Engenharia Mecânica no curso de Doutorado em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná, na área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi Coorientador: Prof. Dr. Guilherme Bertoldo

Curitiba

CATALOGAÇÃO NA FONTE – SIBI/UFPR

V6330 Vicentin, Izabel Cecilia Ferreira de Souza

Otimização numérica do contorno de tubeira de motor-foguete para empuxo máximo [recurso eletrônico]/ Izabel Cecilia Ferreira de Souza Vicentin – Curitiba, 2021.

Tese (Doutorado) – Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, na área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi Coorientador: Prof. Dr. Guilherme Bertoldo

1. Engenharia mecânica. 2. Mecânica dos fluídos. 3. Otimização numérica. I. Marchi, Carlos Henrique. II. Bertoldo, Guilherme. III. Título. IV. Universidade Federal do Paraná

CDD 532.05

Bibliotecária: Vilma Machado CRB9/1563



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SETOR DE TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO ENGENHARIA
MECÂNICA - 40001016040P5

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 tese de Doutorado de IZABEL CECILIA FERREIRA DE SOUZA VICENTIN intitulada: OTIMIZAÇÃO NUMÉRICA DO CONTORNO DE TUBEIRA DE MOTOR-FOGUETE PARA EMPUXO MÁXIMO, sob orientação do Prof. Dr. CARLOS HENRIQUE MARCHI, que após terem inquirido a aluna e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua aprovação no rito de defesa.

A outorga do título de doutor 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, 03 de Setembro de 2021.

CARLOS HENRIQUE MARCHI Presidente da Banca Examinadora

ELIZABETH WE NER KARAS
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

VIVIANA COCCO MARIANI Avaliador Externo (PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO PARANÁ)

ADMILSON TEIXEIRA FRANCO
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ)



AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus.

À minha família, em especial ao meu marido Francisco e meu filho João pela compreensão e apoio durante o período de dedicação a este trabalho. Agradeço aos meus orientadores Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi e Prof. Dr. Guilherme Bertoldo, pela orientação, confiança e paciência.

A todos os colegas do Laboratório de experimentação numérica, LENA, pelas contribuições a esta tese e por proporcionarem um ambiente de trabalho agradável.

Agradeço à Universidade Federal do Paraná (UFPR), através do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica pela disponibilidade de espaço físico e equipamentos, bem como ao apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal e Nível Superior (CAPES) e da Fundação Araucária.

Agradeço ao CENAPAD-UFC (Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho da Universidade Federal do Ceará) e ao CESUP (Centro Nacional de Supercomputação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul) pela disponibilidade de recursos computacionais para desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço aos membros que compõem a banca, Prof. Dr. Admilson Teixeira Franco, Prof^a. Dra. Elizabeth Wegner Karas e Prof^a. Dra. Viviana Cocco Mariani pelo tempo dispensado e pelas sugestões e críticas apontadas para a melhoria deste trabalho.



RESUMO

Bocais convergente-divergente, também chamados bocais de Laval, são dispositivos utilizados em motores-foguete e motores a jato. A função de tais dispositivos é acelerar o escoamento de velocidades subsônicas para supersônicas. Em motores-foguete, o propelente é armazenado na câmara de combustão, e constitui de 80% a 90% da massa total do equipamento. Portanto, a tarefa de maximizar a eficiência ou o impulso específico de tal dispositivo é de grande importância. Uma das maneiras de fazê-lo é através da otimização da geometria de bocais do tipo convergente-divergente. A literatura apresenta inúmeros trabalhos na área de otimização da região divergente, porém são poucos os trabalhos que estudam o efeito da geometria da região convergente no desempenho de motores-foguete. Alguns trabalhos afirmam, ainda, que o impacto no desempenho é pequeno e que apenas um formato suave nessa região é suficiente. Trabalhos recentes mostram que essa região impacta significativamente os parâmetros de propulsão. Com base nisso, o presente trabalho propõe a maximização do empuxo através do Método de Otimização de Forma, empregando 1, 2, 4 e 8 variáveis na região do convergente de uma tubeira operando no vácuo. As variáveis constituem-se em ordenadas de pontos sobre o perfil a ser otimizado, interpolados por spline cúbica. As variáveis citadas são obtidas iterativamente pelo algoritmo de otimização denominado SLSQP (Sequential Least SQuare Programming). O escoamento foi modelado matematicamente pela equação de Euler com o código computacional Mach2D e resolvido numericamente pelo Método dos Volumes Finitos. Com o objetivo de aumentar a acurácia das soluções, a técnica de Multiextrapolação de Richardson (MER) foi utilizada no processo de otimização. Para todos os casos o perfil com 8 variáveis apresentou o maior valor para o empuxo. Resultados mostram que é possível aumentar o coeficiente de empuxo em 1,6% em relação à tubeira BMG45-15 da National Aerospace and Space Administration (NASA). Com relação às tubeiras Proto-33 e Proto-36 os aumentos no coeficiente de empuxo foram de 0,5 e 0,6% respectivamente. Após obter o perfil de convergente otimizado, o método de Rao foi empregado para obter a geometria otimizada do divergente. O aumento final no empuxo, considerando toda a tubeira otimizada, foi de 3% com relação à tubeira BMG45-15.

Palavras-chave: Bocal convergente-divergente. Otimização numérica. Dinâmica dos Fluidos Computacional. Foguete. Propulsão.

ABSTRACT

Convergent-divergent nozzles, also called Laval nozzles, are devices used in rocket engines and jet engines. The function of such devices is to accelerate the flow from subsonic to supersonic velocities in order to produce thrust. In rocket engines, the propellant is stored in the combustion chamber and constitutes 80% to 90% of the total mass of the equipment. Therefore, the task of maximizing the efficiency or specific impulse of such a device is of great importance. One of the ways to do this is by optimizing the geometry of convergent-divergent nozzles. The literature presents numerous works concerned with optimization of the divergent region, however, few works study the effect of the geometry of the convergent region on the performance of rocket engines. Many papers claim that only a smooth format in this region is sufficient, since the impact on performance is small. Recent work shows that this region significantly impacts propulsion parameters. Based on this, the present work proposes the maximization of thrust through the Shape Optimization Method, employing 1, 2, 4 and 8 variables in the convergent region of a nozzle operating in vacuum. The variables are ordinates of points on the profile to be optimized, interpolated by cubic spline. The variables are obtained iteratively by the optimization algorithm called SLSQP (Sequential Least SQuare Programming). The flow was mathematically modeled by the Euler equation with the Mach2D computational code and numerically solved by the Finite Volume Method. In order to increase the accuracy of the solutions, the Richardson Multiextrapolation (MER) technique was used in the optimization process. For all cases, the profile with 8 variables presented the highest value for thrust. Results show that it is possible to increase the thrust coefficient by 1.6% compared to the National Aerospace and Space Administration (NASA) BMG45-15 nozzle. Regarding the Proto-33 and Proto-36 nozzles, the increases in the thrust coefficient were 0,5 and 0,6% respectively. After obtaining the optimized convergent profile, Rao's method was used to obtain the optimized geometry of the divergence. The final increase in thrust, considering the entire optimized nozzle, was 3% over the BMG45-15 nozzle.

Keywords: Convergent-Divergent Nozzle. Optimization. Computational Fluid Dynamics. Rocket. Propulsion.

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ASME American Society of Mechanical Engineers

CDS Central Differencing Scheme

DDS Downstream Differencing Scheme

EUA Estados Unidos da América

ESA European Space Agency

ER Extrapolação de Richardson

CFD Computational Fluid Dynamics

ISECG International Space Exploration Coordination Group

ISS International Space Station

MER Multiextrapolação de Richardson

MDF Método das Diferenças Finitas

MVF Método dos Volumes Finitos

MOC Método das características

MOGA Multiobjective Genetic Algorithm

NASA National Aeronautics and Space Administration

NEP Propulsão Elétrica Nuclear

NCG Newton Conjugate Gradient

NPR Nozzle Pressure Ratio

NRC National Research Council

NTP Propulsão Térmica Nuclear

RSS Restricted Shock Separation

SEP Propulsão Elétrica Solar

SLS Space Launch System

SLSQP Least Squares Programming Algorithm

TIC Truncated Ideal Contour

 ${\bf TOC} \qquad \qquad {\it Thrust \ Optimized \ Contour}$

 $TOP \qquad \qquad Thrust \ Optimized \ Parabola$

UDS Upwind Differencing Scheme

LISTA DE SÍMBOLOS

Romanos

c	Velocidade do som	m/s
C^{ϕ}	Coeficiente da equação geral da Conservação da Quantidade de Movimento	_
c_i	Coeficientes da equação geral do erro de truncamento	_
C_{i}	Coeficientes da equação geral do erro de discretização	_
C_d	Coeficiente de descarga	
c_p	Calor específico a pressão constante	J/(kgK)
C_v	Calor específico a volume constante	J/(kgK)
C_{fv}	Coeficiente de empuxo no vácuo	
E	Erro numérico	
f	Perfil da tubeira	m
F^*	Empuxo dinâmico adimensional	
g_r	Aceleração da gravidade	$\mathrm{m/s^2}$
G	Número total de malhas	
h	Tamanho dos elementos da malha	m
H	Entalpia	J/kg
I_s	Impulso específico	S
L	Comprimento	m
L_{conv}	Comprimento do convergente da tubeira	m
L_{div}	Comprimento do divergente da tubeira	m
L_T	Comprimento total da tubeira	m
m	Nível de extrapolação de Richardson	
M	Número de Mach	_

\dot{m}	Vazão mássica	kg/s
P	Volume elementar	
p	Pressão	Pa
P_{atm}	Pressão atmosférica	Pa
p_L	Ordem assintótica do erro de discretização	_
p_m	Ordem de acurácia resultante quando da aplicação de MER	_
p_U	Ordem aparente do erro de discretização	_
q	Razão de refino da malha	_
r	Coordenada radial	m
R	Constante dos gases ideais	J/(kgK)
R_{c1}	Raio entre a câmara de combustão e semiângulo do convergente	0
R_{c2}	Raio de curvatura na região da garganta, no convergente	0
R_{c3}	Raio de curvatura na região da garganta, no divergente	0
r_g	Raio da garganta da tubeira	m
R_{in}	Raio da entrada da tubeira	m
R_{out}	Raio da saída da tubeira	m
S^*	Área da garganta	m^2
t	Tempo	S
T	Temperatura	K
u	Velocidade axial	m/s
U_C	Incerteza numérica obtida com o estimador Convergente	_
U_{GCI}	Incerteza numérica obtida com o estimador GCI	_

U_m	Incerteza numérica obtida com o estimador baseado em MER	_
U_{mc}	Incerteza numérica obtida com o estimador multicoeficiente	_
U_{Ri}	Estimativa do erro numérico obtida com o estimador de Richardson	_
v	Velocidade na direção radial	m/s
\mathbf{r}	Vetor de variáveis discretas de otimização	m
z	Coordenada axial	m
Gregos		
α	Semiângulo do convergente	0
β	Semiângulo do divergente	0
$arepsilon_ au$	Erro de truncamento	_
ε_n	Erro de iteração	_
$arepsilon_{\pi}$	Erro de arredondamento	_
$arepsilon_p$	Erro de programação	_
γ	Razão entre calores específicos	_
η	Coordenada do sistema curvilíneo	_
ϕ	Solução numérica da variável de interesse	_
ϕ_C	Solução numérica convergente	_
Φ	Solução analítica exata da variável de interesse	_
ϕ_{∞}	Solução numérica estimada	_
ρ	Massa específica	${\rm kg/m^3}$
θ	ângulo	0
ξ	Coordenada do sistema curvilíneo	_

Sobrescritos

i, ii, iii, ... Derivadas primeira, segunda, terceira ...

Subscritos

e, w, n, s Refere-se as faces do volume elementar

 ${\cal E}$ Volume à leste em relação ao volume ${\cal P}$

nb, NB Indica o volume vizinho

P Volume no ponto P

W Volume à oeste em relação ao volume ${\cal P}$

WW Volume à oeste em relação ao volume W

0 Relativo as propriedades de estagnação

1 Relativo a malha mais grossa

2 Relativo a malha mais fina

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO 18
1.1	Definição do Problema
1.2	Importância do Problema
1.3	Objetivos do Trabalho
1.4	Estrutura do Trabalho
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA
2.1	Divergente
2.2	Convergente
3	METODOLOGIA
3.1	Modelo Físico
3.2	Modelo Matemático
3.2.1	Condições de contorno
3.3	Modelo Numérico
3.3.1	Construção da malha
3.3.2	Equações em coordenadas generalizadas
3.3.3	Correção da pressão
3.3.4	Algoritmo
3.4	Pós-Processamento
3.5	Otimização
3.5.1	Função Objetivo
3.5.2	Representação Matemática da Geometria
4	VERIFICAÇÃO
4.1	Estimadores de Erro de Discretização 6
4.1.1	Multiextrapolação de Richardson
4.2	Otimização com MER
4.3	Verificação de código
4.4	Verificação de solução
4.4.1	Resultados
4.4.2	Resumo do Capítulo
5	VALIDAÇÃO
6	RESULTADOS DAS OTIMIZAÇÕES 93
6.1	Ambientes computacionais
6.2	Parâmetros do otimizador SLSQP

6.3	Otimizações no convergente
6.3.1	Otimização com MER
6.3.2	Resumo das otimizações no convergente
6.4	Otimizações no convergente e divergente da tubeira 117
7	CONCLUSÃO
7.1	Contribuições
7.2	Sugestões para trabalhos Futuros
	REFERÊNCIAS
	APÊNDICE A – PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUEN-
	CIAL
	APÊNDICE B – COEFICIENTES E TERMOS FONTE DOS
	SISTEMAS DAS EQUAÇÕES LINEARES 137
	APÊNDICE C-COEFICIENTES E TERMOS FONTE DA
	EQUAÇÃO DE CORREÇÃO DE PRESSÃO 139
	APÊNDICE D – COEFICIENTES E TERMOS FONTE PARA
	OS VOLUMES FICTÍCIOS 140
	APÊNDICE E – MÉTODO DE RAO PARA OBTER CON-
	TORNO DE TUBEIRA PARA EMPUXO
	MÁXIMO
	APÊNDICE F – LEITURAS DO GRÁFICO DE (BACK et
	$al., 1965) \dots 148$
	APÊNDICE G-RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES COM
	A TUBEIRA DE BMG45-15 (BACK et al.,
	$1965) \dots \dots \dots 150$
	APÊNDICE H-EQUAÇÕES DE TRANSPORTE. FONTE:
	$(WHITE, 2002) \ldots 153$
	APÊNDICE I – OTIMIZAÇÕES NO CONVERGENTE - RE-
	SULTADOS COM MER E 8 VARIÁVEIS . 158

ANEXOS	161
ANEXO A – PROPRIEDADES FÍSICAS DO AR	. 162
ANEXO B – GRÁFICO UTILIZADO PARA LEITURA DOS DADOS EXPERIMENTAIS. FONTE: (BACK et al., 1965)	

1 INTRODUÇÃO

Este capítulo introdutório tem como objetivo delimitar o problema a ser abordado na presente tese. As seções a serem apresentadas são: definição do problema, a importância do tema, os objetivos e por fim, a estrutura do trabalho.

DEFINIÇÃO DO PROBLEMA 1.1

Foguetes são veículos cujo movimento é explicado pela terceira lei de Newton ou lei da ação e reação. O dispositivo no qual o empuxo é produzido é denominado bocal convergente-divergente (C-D) ou bocal de Laval ¹. Na Fig. 1 pode ser vista a tubeira do motor-foguete RD-214, desenvolvido pela União das Repúblicas Socialistas Soviéticas (URSS).



Figura 1 – Motor-foguete RD-214.

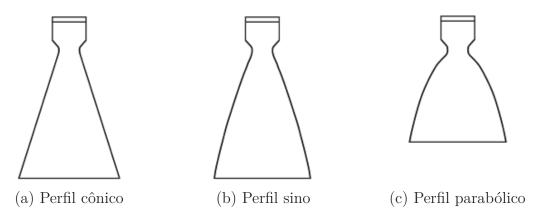
Fonte - (STROSKI, 2018)

Tubeira, bocal de Laval ou bocal convergente-divergente são dispositivos que transformam a energia térmica em energia cinética. Foi criado em aproximadamente 1888 pelo engenheiro sueco Carl G. P. de Laval. No ano de 1893, Laval, numa exposição em Chicago, Estados Unidos, com objetivo de aumentar a eficiência de uma turbina a vapor, incorporou à mesma vários bocais convergente-divergente para que as pás da turbina fossem atingidas por vapor à alta velocidade (ANDERSON, 1990).

A principal função de um bocal C-D é converter eficientemente a energia térmica dos gases em energia cinética. No caso da propulsão química, a energia dos gases é fornecida pela queima do combustível.

Tubeiras são usualmente classificadas de acordo com o formato da seção divergente. Os tipos mais comuns são: cônico, sino e parabólica, Figura 2.

Figura 2 – Tipos mais comuns de tubeiras.



Fonte – Adaptado de Sutton e Biblarz (2016).

As primeiras tubeiras que surgiram foram do tipo cone devido ao processo de manufatura simples (SUTTON; BIBLARZ, 2016), mostrada em a) na Figura 2. Esse tipo de tubeira é usado quando os custos de produção superam os de desempenho. A principal desvantagem desse tipo de tubeira é a perda de desempenho por divergência de fluxo, ou seja, é desejável que o escoamento seja redirecionado axialmente na seção divergente (HOFFMAN, 1987).

A tubeira cuja velocidade é uniforme e axial na saída, e cuja pressão é igual à pressão ambiente é denominada tubeira ideal. O contorno de tal tubeira pode ser obtido utilizando o método das características (*Method of Characteristcs*, *MOC*). Uma das desvantagens desse método é gerar tubeiras excessivamente longas e consequentemente muito pesadas, como resultado da hipótese de escoamento paralelo e uniforme na saída da tubeira. Entretanto percebeu-se que o seccionamento na tubeira influenciaria pouco o escoamento (AHLBERG, 1961). A esse tipo de tubeira truncada deu-se o nome de Tubeira de contorno ideal (*Truncated Ideal Contour*, *TIC*).

Posteriormente, com objetivo de otimizar a seção divergente, diversos trabalhos foram realizados (HOFFMAN, 1987) sendo um dos mais populares o trabalho realizado por Rao (1958), baseado no método das características ² e no cálculo variacional ³. O método

O método das características será abordado na seção 3, de Metodologia

³ Cálculo variacional: constitui-se na generalização do cálculo elementar de máximos e mínimos de

de Rao (1958) deu origem à tubeira em formato de sino cujo coeficiente de empuxo é superior ao da tubeira com perfil cônico com mesmo comprimento e razão de área, conforme Figura 2, em b). Tubeiras geradas com este procedimento são conhecidas como tubeiras com contorno para empuxo otimizado (Thrust Optimized Contour, TOC), tubeiras sino ou tubeiras de Rao. Posteriormente, (RAO, 1961) sugeriu que o perfil da tubeira TOC poderia se aproximado por parábola, dando origem à tubeira parabólica de perfil otimizado (Thrust Optimized Parabola, TOP), mostrada em c) na Figura 2.

Apesar da hipótese de escoamento isentrópico, o método de Rao foi usado largamente por vários anos no projeto preliminar e fabricação de tubeiras e tornou-se a base do que se convencionou denominar de métodos clássicos (CAI et al., 2007). Nesse caso, uma correção para a camada limite é adicionada para compensar os efeitos viscosos. Entretanto, conforme o número de Reynolds diminui, a precisão da correção da camada limite dos métodos clássicos se torna menos efetivo (KIM, 1993).

Com o surgimento de computadores de alto poder de processamento e armazenamento foi possível aos cientistas, através da Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD), resolver modelos de escoamento mais complexos, como Navier-Stokes, modelos de turbulência e modelos químicos de escoamento (MALISKA, 2017). Os recentes avanços na área computacional permitiram o aumento exponencial de trabalhos na área e uma série de métodos numéricos pra otimização. Dentre os mais utilizados encontra-se a otimização baseada em CFD (CFD-Based Optimization).

Na otimização baseada em CFD, o código para a solução do problema físico é geralmente acoplado ao processo de otimização. Um procedimento de otimização típico inclui uma série de passos gerais (HUSSAINI; KORTE, 1996):

- 1. Especificação dos requisitos de projeto;
- Construção da função objetivo (F.O). O mínimo e o máximo que produzem os requisitos de projeto;
- 3. Um conjunto de variáveis é especificado com um valor inicial;
- 4. Uma solução CFD inicial é computada utilizando as variáveis fornecidas;
- A função objetivo (F.O.) é computada como sendo a diferença entre os requisitos de projeto e a solução CFD;
- 6. O problema de otimização é resolvido, dando origem ao novo conjunto de variáveis;
- 7. A nova solução CFD é computada e comparada com os requisitos de projeto;

funções reais de uma variável. A ideia consiste em encontrar funções para as quais um funcional atinge máximos ou mínimos (funcionais podem ser, por exemplo, formados por integrais envolvendo uma função incógnita e suas derivadas).

8. Se os requisitos de projeto alcançarem a tolerância especificada, então o procedimento para. Caso contrário o procedimento é repetido desde a etapa 4.

De modo geral, o que difere em trabalhos de otimização baseada em CFD são os algoritmos usados para ajustar a geometria do divergente à medida que o processo avança. Dentre alguns trabalhos pode-se citar os trabalhos de Cai et al. (2007), Kim (1993), Xing e Damodaran (2004), Yumuşak e Eyi (2012), Quintao (2012), entre outros. Seguindo nessa linha, o presente trabalho utiliza-se do Método de Volumes Finitos (MVF) para resolver o sistema de equações que modelam o problema físico. Os passos apresentados anteriormente para otimização são gerais, sendo que, para o presente trabalho um procedimento mais detalhado será apresentado no Capítulo 3 de Metodologia. A próxima seção trata da importância do problema abordado na presente tese.

1.2 IMPORTÂNCIA DO PROBLEMA

De acordo com Caisso et al. (2009) um dos pontos mais relevantes a serem considerados como potenciais melhorias a médio e longo prazos em propulsão líquida é a redução do custo de lançamento e projeto de foguetes. Cada segundo adicional de impulso específico resulta no aumento significativo da carga útil. No caso do veículo Ariane, cada segundo de impulso específico resulta no aumento de 100 kg de carga útil. Outros pontos importantes de melhorias são o aumento de confiabilidade (e consequente redução em falhas) e aumento na vida útil dos equipamentos e veículos, permitindo a reutilização dos mesmos.

O baixo custo, confiabilidade e maturidade das técnicas quando alcançados, resultam no aumento da frequência de acesso ao espaço. De fato, o turismo espacial está em ascensão e só será viável com a potencial queda do custo de técnicas de propulsão. A demanda por baixo custo também é resultado da retomada do interesse pela exploração espacial e pode ser encontrada nos relatórios de agências espaciais de vários países. Outra tendência é a parceria das principais agências espaciais do mundo para somarem esforços visando a exploração humana do espaço, conforme mostra o *International Space Exploration Coordination Group* (ISECG) (ISECG, 2018). A parceria entre agências pode ser evidenciada pela NASA e ESA que possuem o objetivo em comum de enviarem astronautas à Lua e com objetivo final, a Marte.

O Plano Estratégico da NASA de 2018 mostra que os EUA pretendem desenvolver um programa sustentável de pesquisa científica a longo prazo na exploração do espaço profundo, conforme mostram as principais diretivas do documento NASA (2018a). Entre as diretivas está o lançamento da nave Orion pelo veículo SLS (Sistema de Lançamento Espacial) para a Lua. SLS está em construção e será o veículo mais poderoso construído pela agência norte-americana (NASA, 2021). Este veículo possui um bloco principal com quatro

motores RS-25 (que utiliza combustível líquido criogênico) (NASA, 2018b). A tripulação da nave Orion orbitará a Lua de onde controlarão robôs para explorá-la. Essa tecnologia está sendo testada atualmente por astronautas da Estação Espacial Internacional (ISS), os quais controlam robôs na superfície da Terra. Orion conta com propulsão capaz de levá-la da órbita da Terra até a órbita da Lua. Uma missão não tripulada para a Lua está prevista para 2024, com a missão Artemis 2 e uma tripulada com a missão Artemis 3.

Futuramente, pretende-se usar a nave Orion para rebocar peças para construção de uma estação espacial na Lua, chamado "Portal Lunar". Com base nesse Portal Lunar as próximas missões poderão ir além, como as missões para Marte previstas para 2030.

Um relatório da National Research Council (NRC) de 2014 mostra que:

Para destinos distantes, limitações na duração das explorações humanas impõem um mínimo de velocidade nas espaçonaves, difíceis de serem atingidas. Exemplos de projetos para missões para Marte sugerem que a propulsão química (a única tecnologia que permitiu até então missões tripuladas) pode ser capaz de levar o homem à órbita de Marte e voltar se substancial progresso for feito no armazenamento de propelentes criogênicos por longos períodos e mínimas perdas. Outros tipos de propulsão - tais como Propulsão Elétrica Solar (SEP), Propulsão Elétrica Nuclear (NEP) e Propulsão Térmica Nuclear (NTP) - poderiam ser usados para apoiar missões tripuladas até a superfície de Marte. Entretanto, o desenvolvimento de sistemas operacionais de alta potência que usam qualquer desses conceitos despenderiam maior empreendimento (BOARD et al., 2014, pp. 114).

Em contrapartida, a Roscosmos⁴ (Agência Espacial Russa) está desenvolvendo desde 2009 um foguete movido à propulsão nuclear com objetivo de lançá-lo a Marte. Segundo Vladimir Koshlakov, chefe do Centro de Pesquisas Keldysh na Rússia, a tecnologia sendo desenvolvida é inovadora e irá ser um marco no desenvolvimento tecnológico e científico. Apesar disso, tecnologias revolucionárias ainda estão em desenvolvimento e demandam tempo, recursos financeiros e humanos, o que indica que a Roscosmos possivelmente não lance seu foguete para Marte antes de 2030.

Finalmente, motores químicos possuem altas relações entre peso bruto do foguete e peso da carga útil, ou seja, o peso de propelente é de aproximadamente 90% do peso total de um lançador. Portanto, mesmo pequenas melhorias, como o incremento de 1% na eficiência, podem ter grandes resultados em termos de custos.

Vários trabalhos foram feitos com objetivo de obter melhorias no desempenho de tubeiras. A grande maioria dos trabalhos busca melhorias na região do divergente (CAI et al., 2007), (YUMUŞAK; EYI, 2012), (FREY et al., 2017). Por outo lado, são poucos os trabalhos na literatura que estudam o convergente e de maneira geral parece consenso que esta região não afeta significativamente o desempenho da tubeira (SUTTON; BIBLARZ,

https://www.facebook.com/tvroscosmos/videos/571329819976447

2016). Dos poucos da literatura, o trabalho de Germer (2014) mostrou que a geometria dessa região influencia significativamente o desempenho de motores-foguete.

Devido ao potencial de melhoria no desempenho e pelos poucos trabalhos na área é possível ampliar o estudo e resultados para essa região.

1.3 OBJETIVOS DO TRABALHO

O objetivo deste trabalho consiste em determinar a forma geométrica da seção convergente da tubeira que produza o máximo coeficiente de empuxo. Nas otimizações, o comprimento do convergente, diâmetro de entrada, raio de garganta, e divergente são mantidos fixos. O modelo matemático considerado é Euler (WHITE, 2002), conforme será mostrado na Seção 3, de Metodologia. As condições de operação (temperatura de estagnação e pressão de estagnação) são constantes. As condições de contorno também são mantidas em todos os testes. As otimizações serão realizadas com base na tubeira BMG45-15 da NASA (BACK et al., 1965), mantendo-se todo o divergente constante, bem como o comprimento e o raio de entrada do convergente.

A geometria da tubeira BMG45-15 pode ser dividida em seis partes conforme mostra a Fig. 3. Ela é um dos problemas abordados por Back et al. (1964). O motor tem comprimento total L_T de 0,185039 m, raio de entrada interno máximo R_{in} de 0,0635 m e raio interno mínimo (garganta) r_g , de 0,02032 m. A geometria foi dividida em 6 partes, da esquerda para a direita:

- 1. Câmara de combustão: seção constante de raio R_{in} 0,0635 m e comprimento L_1 de 0,007874 m.
- 2. Transição de seção com arredondamento de raio R_{c1} de 0,02032 e comprimento L_2 de 14,3764 m.
- 3. Tronco de cone convergente de comprimento L_3 de 0,03363 mm e ângulo com a horizontal de 45°.
- 4. Transição de seção até a garganta com arredondamento de raio R_{c2} de 0,0127 m e comprimento L_4 de 0,008992 m.
- 5. Transição de seção após a garganta com o mesmo raio de arredondamento R_{c3} 0,0127 m e comprimento L_5 0,003277 m.
- 6. Tronco de cone divergente de comprimento L_6 de 0,1169 m e ângulo com a horizontal de 15°.

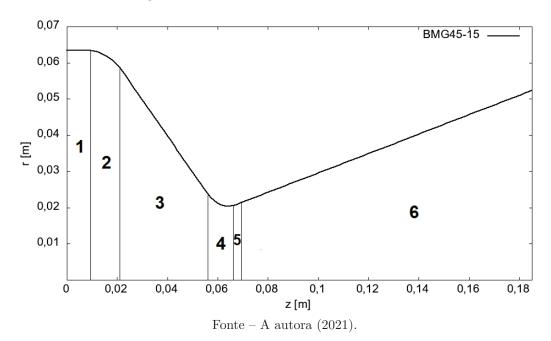


Figura 3 – Geometria da tubeira BMG45-15.

Mais detalhes com relação à simbologia utilizada na descrição da geometria pode ser vista na Fig. 5. A Tab. 1 apresenta os dados utilizados em todas as simulações (nas otimizações).

Tabela 1 – Parâmetros usados nas simulações com o código computacional Mach2d 6.4.

Tipo de parâmetro	Descrição	Valor
Parâmetros físicos	Temperatura de estagnação (T_0) Pressão de estagnação (P_0) Razão entre calores específicos (γ) Constante do gás (R)	833,3333 <i>K</i> 1 725 068,0 <i>Pa</i> 1,35 287 <i>J/kg.K</i>
Parâmetros ao nível do mar	Pressão atmosférica (P_{atm}) Aceleração gravitacional (g_0)	$101 \ 325,0 \ Pa 9,80665 \ m/s^2$

Fonte – A autora (2021).

Os resultados detalhados das simulações realizadas utilizando a tubeira BMG45-15 serão discutidos na Seção 4.4. Os resultados das simulações realizadas com o código computacional Mach2D com esta tubeira podem ser vistas no Apêndice G. A Fig. 66 (no Apêndice G) mostra o campo de Mach, cujo valor máximo é aproximadamente 3,5. Os detalhes dos modelos físico, matemático e numérico para obtenção desses resultados são discutidos na Seção 3.

As etapas para solução do objetivo da tese são:

- Realizar a verificação e solução do código computacional Mach2D;
- Validar a solução numérica obtida através dos códigos Mach2D, com base em trabalhos de referência da literatura;
- Escrever e utilizar um programa computacional em Python para executar a otimização;
- Avaliar a sensibilidade da função objetivo (F.O.) em relação ao número de variáveis de otimização, utilizando 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis;
- Aplicar o método de Multiextrapolação de Richardson (MER) para obter resultados mais acurados e assim acelerar a convergência da solução;
- Otimizar divergente a partir do convergente otimizado com o método de Rao (RAO, 1958); e
- apresentar as estimativas de erro numérico para todos os resultados obtidos.

A literatura mostra que são poucos os trabalhos realizados na área de otimização com objetivo de estudar a região do convergente. Dentre os mais recentes, pode-se citar os trabalhos de Mir et al. (2017) e Germer (2014). O trabalho de Mir et al. (2017) mostra o efeito do comprimento do convergente no coeficiente de empuxo para uma tubeira com convergente cônico e divergente cônico mantido fixo. Nesse estudo, os autores mostraram que o coeficiente de empuxo varia com o comprimento do convergente e que existe um valor máximo bem definido. Na faixa de comprimentos de convergente estudada, o semiângulo de convergente foi variável. Os autores estudaram os modelos viscoso e turbulento.

Germer (2014) avaliou o efeito de vários parâmetros geométricos no empuxo. Os parâmetros avaliados foram o semiângulo do convergente, raio de curvatura na região da garganta e raio curvatura na entrada da tubeira. O autor mostra que o parâmetro com maior influência no empuxo é o raio de curvatura na garganta, seguido da inclinação do convergente.

Pelo exposto acima, pode-se afirmar que a presente pesquisa é inédita no sentido de que ainda não se encontrou na literatura trabalhos de otimização de forma com objetivo de determinar o quanto o coeficiente de empuxo pode ser aumentado considerando apenas o perfil do convergente.

1.4 ESTRUTURA DO TRABALHO

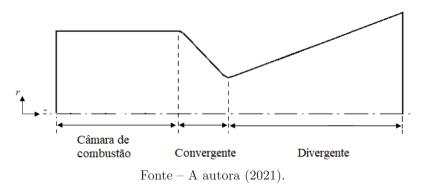
O presente trabalho é constituído de sete capítulos. No primeiro capítulo foi apresentado o problema a ser resolvido de maneira geral. Os demais capítulos são brevemente descritos como se segue:

- O segundo capítulo apresenta a revisão bibliográfica do trabalho. São abordados os trabalhos de otimização realizados no divergente, convergente e em toda a tubeira.
- No terceiro capítulo é descrita a metodologia a ser empregada. São apresentados os modelos físico, matemático e numérico. Na metodologia são apresentados ainda o procedimento geral para otimização e detalhes sobre o método de otimização empregado;
- No capítulo quatro são apresentados os procedimentos de verificação de código e de solução;
- No capítulo cinco é apresentado o procedimento de validação;
- No sexto capítulo são apresentados os resultados e discussões; e
- No último capítulo são apresentadas as conclusões, contribuições e sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esse capítulo trata do estado da arte do tema otimização de forma em tubeiras convergente-divergente de motores-foguete. A grande quantidade de trabalhos recentes mostra a atualidade e relevância do assunto na área de propulsão. Esse capítulo é dividido nas seções 2.1 e 2.2 que apresentam nesta ordem os trabalhos desenvolvidos sobre as regiões convergente e divergente. A Figura 4 mostra uma tubeira genérica em corte, com suas regiões típicas. Considere que r e z são as direções radial e axial respectivamente. A câmara de combustão é a região onde a queima de propelente é realizada. Nela, a pressão de câmara desenvolvida é de importância crucial para a operação bem-sucedida de um motor-foguete (SUTTON; BIBLARZ, 2016). O convergente e divergente são as regiões nas quais o fluido é acelerado.

Figura 4 – Tubeira genérica e suas partes.



2.1 DIVERGENTE

Os primeiros trabalhos utilizando técnicas de otimização em tubeiras foram realizados na década de 50. Um dos principais trabalhos, o de Rao (1958), utiliza o Método das Características (*Method of Characteristics*, MOC) em conjunto do método das variações para obter o perfil cujo empuxo é máximo. O comprimento da região divergente, pressão na saída da tubeira e o contorno na região da garganta devem ser fornecidos. O escoamento é considerado isentrópico. O incremento no coeficiente de empuxo obtido por Rao (1958) foi significativo (até 2,3%) em relação a tubeira cônica de mesmo comprimento e razão de área. O autor mostrou que a razão entre calores específicos tem efeito considerável na forma da tubeira. De acordo com Rao (1958) aumentando o valor da razão entre calores específicos, a área de saída da tubeira reduz. Rao (1958) também mostrou que quanto maior for a razão de área maior será o incremento no coeficiente de empuxo.

Uma das desvantagens do método de Rao é considerar o escoamento isentrópico. Apesar disso, muitos trabalhos utilizam o método de Rao com a correção da camada

limite (SMITH et al., 1987). Posteriormente percebeu-se que a tubeira TOC poderia ser aproximada por parábola, dando origem às tubeiras parabólicas de empuxo otimizado (*Thrust Optimised Parabola*, TOP).

Em estudo experimental realizado por Farley e Campbell (1960) três tubeiras de Rao são comparadas a uma tubeira cônica com 15 graus no divergente e razão de expansão igual a 25. As tubeiras de Rao testadas foram projetadas com razão de expansão 10, 15, 20. Todas as tubeiras utilizadas possuíam o mesmo diâmetro de garganta. Resultados mostram que o empuxo obtido com as tubeiras otimizadas com o método de Rao foi maior que o obtido com a tubeira cônica nos três casos. O aumento no empuxo foi de até 1% com relação à tubeira cônica. Os autores mostraram também que, para baixas pressões de operação, as tubeiras de Rao apresentam uma região de separação do escoamento maior do que as tubeiras cônicas.

Cai et al. (2007) realizaram a otimização de tubeira com objetivo de obter empuxo máximo. O escoamento foi resolvido utilizando-se as equações de Euler e Navier-Stokes. O modelo também considerou reações químicas (modelo de não equilíbrio químico) e turbulência (modelo de Baldwin-Lomax foi adotado). Para resolver a equação bidimensional de Navier-Stokes e as equações de transporte o esquema Lower-Upper implícito, LU, (SHUEN, 1992) foi adotado. Sete pontos localizados na região do divergente foram usados para determinar a forma da geometria da parede da tubeira. Os pontos foram interpolados com spline cúbica. Três algoritmos foram utilizados para a localização dos pontos máximos da função objetivo: programação quadrática sequencial, algoritmo genético e estratégia de interdigitação (KOCH et al., 2002). Os resultados foram comparados com trabalhos da literatura. A otimização gerou aumento de 1,5% no empuxo com o algoritmo genético e estratégia de interdigitação.

Yumuşak e Eyi (2012) otimizaram o perfil de divergente de tubeira com objetivo de obter empuxo máximo. O escoamento foi baseado nas equações de Euler. O modelo químico considerado foi taxa finita de reação química com oito espécies e onze reações químicas. A equação de Euler bidimensional e as equações de transporte químicas são resolvidas simultaneamente pelo método de Newton. A matriz jacobiana, necessária nesse método, é calculada numericamente e analiticamente. As sensitividades (componentes da matriz jacobiana) são calculadas pela resolução do problema adjunto. Os resultados mostraram que, utilizando-se as funções de Hicks-Henne, é possível aumento de 2,56% com relação a perfil de base cônico.

Vários trabalhos na literatura propõem geometrias diferenciadas como será mostrado. Pathan *et al.* (2018) conduziram uma investigação usando a abordagem CFD para avaliar o efeito do número de Mach no escoamento supersônico na saída de tubeira cujo

¹ É a razão entre as áreas na seção da saída e na seção da garganta da tubeira.

divergente possuía expansão abrupta na forma de duto circular de raio constante. O objetivo da pesquisa foi determinar as condições para empuxo e razão de área máximos considerando vários números de Mach. As tubeiras foram modeladas com o software Ansys obtendo números de Mach iguais a 1,5; 2,0 e 2,5. Devido à expansão abrupta, é formada uma região de recirculação com pressões muito baixas, menores que a atmosférica. Os resultados mostram que o escoamento (descolado) volta a atingir a parede do duto em um ponto que depende da expansão de área, diâmetro do tubo, nível de pressão (chamado de NRP, Nozzle Pressure Ratio) e do número de Mach. O escoamento foi simulado para NRP na faixa de 2 a 8. As razões de áreas estudadas foram de 2, 4, 6, 8 e 10. Os autores concluíram que o escoamento na região expandida é fortemente influenciado pelo NPR, pela presença de alívio na saída da tubeira (antes da região expandida) e pelo número de Mach. Com o aumento do NPR, a razão de área deve também aumentar. Com NPR de 2 e 5, a razão de área 4 resulta no maior valor de empuxo para todos os números de Mach. Para NPR de 8, a razão de área 6 resulta no maior valor de empuxo para Mach de 1,5. Finalmente, para NPR igual a 8, a razão de área 4 resulta em maior valor de empuxo para números de Mach de 2,0 e 2,5

Sushma et al. (2017) investigaram a performance de tubeira cônica chanfrada em ângulo de 52 graus através de simulações numéricas utilizando o software Fluent (GUIDE, 2006). Esse tipo de tubeira pode ser uma solução para ajuste do vetor empuxo por exemplo em mísseis. O escoamento foi considerado viscoso e o modelo de turbulência foi $\kappa - \epsilon$. Os resultados foram comparados com tubeira cônica similar e mostraram que o valor do número de Mach na saída da tubeira é menor para a tubeira chanfrada porém inclinada em ângulo de 3°a 5°. Outros trabalhos com otimização de tubeiras com formatos especiais foi realizado por Zhu et al. (2018). A tubeira projetada é assimétrica e própria para motores scramjets.

Jéger e Veress (2017) realizaram a otimização de tubeira cônica e uma tubeira com contorno sino considerando o modelo invíscido. O trabalho de Jéger e Veress (2017) se diferencia dos demais devido à utilização de malha que se estende para fora da área saída da tubeira. Essa região foi modelada como não viscosa e permitiu a investigação em várias condições de operação, em especial em baixos NPR. A malha utilizada foi não estruturada, 2D axissimétrica. A malha na região do eixo da tubeira e garganta foi construída com maior quantidade de volumes para capturar os detalhes do escoamento. A região do convergente foi mantida constante. Na otimização da tubeira cônica, a variável de projeto foi o diâmetro de saída da tubeira. A construção da geometria foi feita pelo Central Composite Design (CCD) que gera 5 pontos, os quais são ajustados por regressão não paramétrica. Para este caso, os resultados mostram a obtenção da expansão ótima e fraco choque oblíquo e a geometria formada é similar ao formato cônico. No caso da otimização da tubeira com contorno de sino, as variáveis de projeto foram o diâmetro da

garganta e uma coordenada P1 na região mediana do divergente. O método CCD gera 9 pontos também ajustados por regressão não paramétrica. O formato da tubeira gerada é similar ao TOC. O aumento no empuxo, com relação ao formato cônico foi de 1%. Os autores concluem que ambos os casos podem ser utilizados pois concordam bem com os dados da literatura.

Foi possível encontrar na literatura trabalhos que combinavam diferentes funções objetivos (otimização multiobjetivo), tal como comprimento mínimo da tubeira, menor quantidade de choques, máxima uniformidade na saída do escoamento, formação de choques (KUMAR et al., 2013), entre outros. A otimização multiobjetivo possui como vantagem unir, por exemplo, requisitos de projeto de modo que a otimização do empuxo leve em conta nível de tensão, temperatura, massa ou outra propriedade, dentro de certos limites. Esse conceito de otimização foi utilizado por Kamran e Guozhu (2012) cujo objetivo foi obter a massa mínima do sistema e máximo empuxo. O trabalho integrou as partes do envelope, do grão propelente, da câmara de combustão, tubeira e performance balística. Meerbeeck et al. (2013) otimizou o contorno de uma tubeira com objetivo de obter máximo empuxo para um peso e altitude específicos. Os autores concluíram que a geometria obtida é muito similar às tubeiras TOC (Truncated Optimum Contour). Seus resultados, comparados a outros métodos otimizados para altura máxima, apresentam um aumento no empuxo entre 0,5 e 1%, considerando mesmo peso e mesma altitude.

Schomberg et al. (2015) apresentam método para gerar o contorno divergente de tubeiras supersônicas usando arcos circulares. Uma comparação entre tubeiras baseadas no método de arco com as tubeiras com contornos existentes mostra média de redução no comprimento de 7,5%. A curva da geometria foi feita utilizando séries de arcos circulares (seno e cosseno). Os resultados foram gerados com o software Ansys, usando malhas estruturadas, volumes finitos. O escoamento foi considerado turbulento (modelo $\kappa - \epsilon$). Os resultados mostram vantagem geométrica quando o metodo baseado em arcos é aplicado, independente do valor do empuxo atingido. O coeficiente de empuxo calculado é de 0,3 a 1,8% maior do que tubeiras convencionais equivalentes. Além disso, os parâmetros do escoamento mostram que as características de perdas e escoamento separado são equivalentes às tubeiras já conhecidas similares.

Xing e Damodaran (2004) desenvolvem o método para otimização híbrida que combina a aproximação estocástica de aproximação simultânea (SPSA, Simultaneous Perturbation Stochastic Approximation) e o método determinístico de Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) com objetivo de usar as vantagens da alta eficiência dos métodos baseados em gradientes e a habilidade do SPSA na busca global. A função objetivo é empuxo máximo em tubeira de geometria elíptica. Os modelos considerados foram Euler e Navier-Stokes tridimensionais. Splines cúbicas monotônicas foram usadas para definir a superfície da tubeira. O método SPSA é iterativo capaz de encontrar mínimo global

cuja aproximação para o gradiente requer apenas duas avaliações da F.O. Os resultados mostraram que o método baseado em gradiente é mais eficiente para ambos modelos viscoso e invíscido porém são métodos que podem ficar "presos" em mínimos locais. Os métodos híbridos apresentam alta eficiência computacional pois o custo computacional é significativamente menor quando comparado a métodos estocásticos 3D. Os resultados mostram que o valor do empuxo encontrado para o método híbrido é maior do que o obtido pelos métodos SPSA puro, SA (Simulated Annealing) e Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) puro.

Stark et al. (2016) realizaram a otimização em tubeira tipo sino duplo com objetivo de avaliar a tubeira na carga útil. Os dois parâmetros de projeto desse tipo de tubeira são o ponto em que se inicia a extensão da tubeira e o segundo é o ângulo de inflexão. O conceito de tubeira dupla é conceito de alcance auto adaptativo. O contorno da tubeira com inflexão força a separação do escoamento simétrico e controlada abaixo da alta pressão ambiente. Essa etapa é chamada modo nível do mar. Durante a subida do lançador a pressão ambiente diminuiu e a razão de pressão da tubeira (NPR) aumenta. Ao atingir certa altitude, o escoamento "cola" na parede estendida da tubeira, fazendo com que toda a tubeira funcione como convencional. Esta etapa é denominada modo de altitude. Os resultados analíticos e numéricos mostram ganho de 490 kg de carga útil para o veículo Ariane 5.

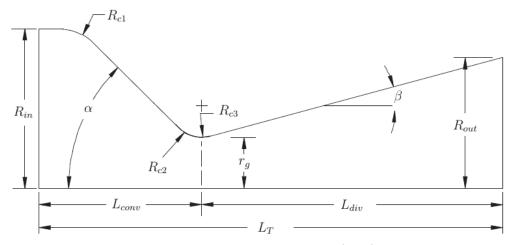
Frey et al. (2017) desenvolvem tubeira que combina elementos das tubeiras TIC e TOP. A tubeira resultante (TICTOP) tem a vantagem de ser livre de choque como a TIC e não induz à separação do escoamento Restricted Shock Separation (RSS). Os autores constataram que nas tubeiras TOP apenas pequena região do contorno contribui para o choque, portanto, nessa região o contorno das tubeiras ideais e em seguida o contorno parabólico é usado. Para o projeto, dois parâmetros foram determinados, o número de Mach da "parte TIC" da tubeira e a posição axial de transição entre os dois perfis. Para cada parâmetro quatro diferentes valores foram assumidos dentro de limites razoáveis, levando ao total de 16 combinações. Os resultados mostraram que todas as simulações com as 16 tubeiras tinham poucas diferenças no impulso específico e a performance foi similar à tubeira usada para validação. Este tipo de tubeira é, portanto, adequada para aplicação em lançadores onde a separação do escoamento e cargas são importantes considerações de projeto.

2.2 CONVERGENTE

Quanto à geometria do convergente, existe certa concordância que esta região não afeta o desempenho da tubeira, possivelmente devido à isso, a literatura apresenta uma quantidade consideravelmente menor de trabalhos na região. Dentre os trabalhos mais importantes, pode se citar o de Back *et al.* (1965). Neste trabalho, os autores apresentam

medidas experimentais de pressão estática de tubeiras com diferentes razões de raios (razão entre o raio de curvatura na transição convergente e divergente e raio de garganta, ou seja, Rc2/Rg), conforme mostra a Fig. 5.

Figura 5 – Partes da geometria de tubeira com formato cônico.



Fonte – Adaptada de Back et al. (1965)

Ainda na Fig. 5, considera-se que R_{in} é o raio da entrada da tubeira, R_{out} é o raio de saída da tubeira, α é o semiângulo do convergente, β é o semiângulo do divergente, R_{c1} é o raio de curvatura na região do plennum (na região final da câmara de combustão), R_{c2} é o raio de curvatura na região do convergente, R_{c3} é o raio de curvatura na região do divergente, L_{conv} é o comprimento do convergente, L_{div} é o comprimento do divergente e L_{T} é o comprimento total da tubeira.

A seção convergente das tubeiras testadas possuíam formato cônico ou circular. Todas as tubeiras apresentaram divergente com formato cônico. O fluido de trabalho utilizado foi o ar para ampla faixa de temperaturas (21,3 a 560 graus Celsius) e pressões de estagnação (3,1 a 17,2 bar). Os autores apontam que o erro estimado da pressão estática medida na região divergente e garganta é inferior a 1% e na entrada da tubeira é de 5%. A comparação com a teoria (modelo 2D) mostra que os valores concordam para tubeiras com razão de raios igual a dois, mas é inadequada para as tubeiras com razões de raios menores. Os autores também concluíram que as medidas de pressão estática na garganta e na região divergente não eram influenciadas pelas condições de operação.

Hill e Hopkins (1966) estudaram os efeitos do semiângulo do convergente na região transônica e o raio de curvatura na região do convergente. Os autores investigaram os raios na faixa de 0,25 a 3,0 vezes o raio da garganta. O escoamento foi modelado como permanente, irrotacional, adiabático e gás ideal. Os autores concluíram que o raio de curvatura tem efeito acentuado no padrão do escoamento na garganta. Uma diminuição desse raio move a intersecção da linha sônica com a parede no sentido a montante e na intersecção com o eixo de simetria no sentido a jusante. O semiângulo não afeta

significativamente o escoamento a não ser que o raio de curvatura seja menor que o da garganta e mesmo assim o efeito é secundário. Seus resultados foram obtidos pelo método de Sauer. Excelente concordância com os resultados da literatura foram obtidos.

Germer (2014) realizou estudo do convergente cônico de tubeiras de motoresfoguete com objetivo de avaliar seu efeito em parâmetros de desempenho tais como
coeficiente de empuxo no vácuo e impulso específico. Foram avaliadas três regiões do
convergente: o raio entre plenum e convergente, semiângulo do convergente e raio de
curvatura na transição convergente/garganta. Os parâmetros de desempenho avaliados
foram o coeficiente de empuxo e descarga e impulso específico.

O fluido de trabalho foi o ar. O escoamento foi modelado como invíscido em regime permanente. Os resultados mostraram que a região cuja geometria mais influencia os parâmetros de desempenho é o raio de curvatura na transição convergente/garganta, seguido do semiângulo de inclinação. A curvatura entre plenum e convergente apresenta pouca influência. O autor avaliou tubeiras com diferentes razões de raios (0,375; 0,625; 1,0 e 1,5) e mostrou que tubeiras com razões de raio iguais a 0,375 e 0,625, o semiângulo de convergente afeta parâmetros de desempenho da tubeira, o que não ocorre com os tubeiras com razões de raio iguais a 1,0 e 1,5. Concluiu, portanto, que à medida que a razão de raios aumenta, a influência da inclinação do convergente nos parâmetros de desempenho diminui.

Com relação ao raio de curvatura na transição convergente/garganta, o autor constatou que para semiângulo de convergente fixo, o empuxo aumenta conforme a razão de raios aumenta. O autor testou vários semiângulos de convergente e verificou que quanto maior, maior será o impacto da razão de raios no ganho de empuxo. Os resultados mostram que para tubeiras com semiângulo de 45°, o ganho no empuxo total pode chegar a 2,41% ao variar a razão de raios de 0,375 para 1,5. Para semiângulo de 60°, o ganho pode chegar a 2,52% e semiângulo de 80°, pode chegar a 2,58%.

Mir et al. (2017) estudaram a influência do ângulo e comprimento da região convergente de tubeiras cônicas. Os autores utilizaram tubeira base e outras foram modeladas com diferentes comprimentos de convergente e respectivos ângulos. Nos testes a razão de expansão e condições de contorno foram mantidas. O diâmetro de entrada foi estabelecido em 1000 mm, o diâmetro da garganta em 304 mm e o diâmetro de saída em 861 mm. O raio na região da garganta foi mantido constante em 228 mm e o ângulo entre plennum e convergente foi desconsiderado. A pressão, a temperatura e a vazão mássica de entrada foram fornecidos. A malha gerada, mais refinada na região da parede da tubeira, permitiu aumentar a acurácia e visualizar claramente os efeitos de separação do escoamento e da camada limite. A simulação numérica foi realizada no software Fluent (GUIDE, 2006) com o método de volumes finitos e malhas não estruturadas. O escoamento foi modelado pela equação de Navier-Stokes com modelo de turbulência κ - ω . Os resultados mostraram que

existe comprimento que proporciona empuxo máximo. O ângulo que possibilitou empuxo máximo foi 28,5°e comprimento 640 mm para o caso considerado.

A Tab. 2 mostra um resumo dos trabalhos estudados. O último listado na Tab. 2 refere-se ao presente trabalho. Os principais trabalhos que irão contribuir para as discussões que se seguem são os de Back et al. (1964), Germer (2014) e Hill e Hopkins (1966). Com relação ao trabalho de Germer (2014), a principal diferença é a obtenção da geometria, pois neste trabalho, esta não é estritamente cônica, mas descrita por spline cúbica. A seguir, no Capítulo de Metodologia (Cap. 3), serão apresentados detalhes para construção da geometria e obtenção da solução do problema proposto nesta tese.

Tabela $2\,-\,$ Resumo dos trabalhos abordados neste capítulo.

Autor(es)	Modelo	Observações
	Divergente	
Rao (1958)	MOC.	Otimização com cálculo variacional.
Farley e Campbell (1960)	Trabalho Experimental.	Confirmação do trabalho de Rao (1958).
Cai et al. (2007)	Euler e NS. Modelo reativo de não equilíbrio químico. Turbulência: Baldwin-Lomax.	Otimização com PQS, Algoritmo genético, interdigitação.
Yumuşak e Eyi (2012)	Euler. Modelo reativo de taxa finita.	Otimização com método de Newton e funções de Hicks-Henne.
Pathan et al. (2018)	RANS (modelo κ - ϵ).	Estudo de tubeira com seção abrupta na saída.
Sushma et al. (2017)	RANS (modelo κ - ϵ).	Estudo de tubeira chanfrada.
Jéger e Veress (2017)	Euler.	Otimização com método CCD (Central Composite Design).
Kumar et al. (2013), Kamran e Guozhu (2012), Meerbeeck et al. (2013).	isentrópico, Euler e NS respectivamente.	Otimização multiobjetivo.
Schomberg et al. (2015)	RANS (modelo κ - ϵ).	Construção da geometria com série de arcos.
Xing e Damodaran (2004)	Euler e NS (Obs.: 3D).	Otimização híbrida (BFGS e SPSA).
Stark et al. (2016)	Isentrópico.	Tubeira sino duplo para otimização da altitude.
Frey et al. (2017)	NS.	Junção das tubeiras TIC e TOP para empuxo máximo.
	Convergente	
Back et al. (1964).	Trabalho teórico e experimental.	Região do convergente não interfere significativamente no empuxo.
Hill e Hopkins (1966).	Escoamento irrotacional.	Efeito do semiângulo do convergente e raio de curvatura, comparação com as equações de Sauer, Oswatitsch e Hall.
Germer (2014).	Euler.	Efeito do semiângulo do convergente, do raio de curvatura na garganta e raio de curvatura na entrada.
Mir et al. (2017).	RANS κ - ω .	Estudo do comprimento e semiângulo do convergente.
Este trabalho	Euler, emprego de MER.	Otimização com SLSQP e descrição da geometria por spline cúbica.

3 METODOLOGIA

Nesse capítulo são apresentados os modelos físico, matemático e numérico utilizados no trabalho. Em seguida, a função objetivo é apresentada, bem como as considerações sobre o processo de otimização.

3.1 MODELO FÍSICO

No presente trabalho o escoamento no interior da tubeira é modelado como:

- 1. Escoamento bidimensional;
- 2. Escoamento compressível;
- 3. Escoamento não reativo;
- 4. Escoamento em regime permanente;
- 5. Escoamento invíscido;
- 6. Fluido monoespécie;
- 7. Fluido como gás perfeito;
- 8. Gás termicamente perfeito;
- 9. Tubeira com paredes adiabáticas.

Estudos anteriores mostram que o modelo invíscido é adequado. Radtke (2014) obteve soluções do coeficiente de descarga C_d para o modelo (a) invíscido monoespécie com propriedades constantes e também para o modelo (b) viscoso monoespécie com propriedades constantes. Ele mostrou que a diferença entre os resultados obtidos para o modelo (b) e o resultado experimental ($C_d = 0.9770 \pm 0.0051$) apresentado na literatura é de apenas 0,46%. Ou seja, tal valor é inferior à soma das incertezas experimental (0,52%) e numérica (0,15%). Quando o resultado experimental é comparado ao resultado numérico do modelo (a) a diferença é um pouco maior do que a soma das incertezas experimental e numérica. Essa análise foi feita considerando-se o estimador U_{GCI} (para uma malha 2048x1280). Germer (2014) afirma que os modelos invíscido (0,3%) e laminar (0,1%) são adequados para obter o C_{fv} uma vez que as soluções numéricas e suas incertezas estão dentro da faixa do resultado experimental, considerando uma malha 992x1312.

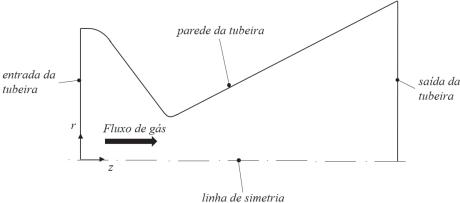
Drikakis e Tsangaris (1993) avaliaram o efeito de gás real em tubeira axissimétrica cônica com semiângulo de convergente de 45° e 15° de seminângulo no divergente. O escoamento foi considerado invíscido (a equação Euler foi utilizada), compressível, e

regime permanente. Os autores utilizaram o método de volumes finitos e uma malha de 50x25 volumes. As simulações foram conduzidas com ou sem adição de calor. Os autores mostram que os efeitos do gás real na distribuição da pressão são pequenos para o caso em que o escoamento ocorre sem adição de calor. Os modelos de gases estudados foram Benedict-Webb-Rubin, de Van-der-Walls, de gás perfeito e de um fator de compressibilidade (z) de 0,3. Os autores concluíram que o modelo de gás perfeito prevê valores abaixo do experimento na distribuição de temperatura na parede da região supersônica. O efeito de gás real é significativo nesta região devido aos efeitos de compressibilidade. Entretanto os desvios com relação os resultados experimentais são menores nos casos sem adição de calor, portanto o modelo de gás ideal pode ser utilizado.

3.2 MODELO MATEMÁTICO

A Fig. 6 mostra de forma esquemática a geometria da tubeira BMG45-15, utilizada para validação e verificação de código. O escoamento na tubeira é modelado matematicamente utilizando as equações de estado, equação de balanço de massa, da quantidade de movimento linear nas direções axial (z) e radial (r) e da energia térmica.

Figura 6 – Geometria de tubeira com formato cônico.



Fonte – Adaptada de Back et al. (1965)

Para escoamentos com simetria axial, o modelo matemático pode ser escrito da seguinte forma (WHITE, 2002):

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v) = 0, \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v u) + \frac{\partial p}{\partial z} = 0, \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho uv) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho vv) + \frac{\partial p}{\partial r} = 0, \tag{3.3}$$

$$c_p \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\rho u T \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho v T \right) \right] = u \frac{\partial p}{\partial z} + v \frac{\partial p}{\partial r}, \tag{3.4}$$

em que ρ , c_p , T, p, u, v, são respectivamente: massa específica (kg/m^3) , calor específico (kJ/K), temperatura (K), pressão (Pa), velocidades nas direções axial e radial (m/s).

Os detalhes da aplicação das hipóteses simplificadoras estão no Apêndice H. A equação de estado dos gases perfeitos é dada por:

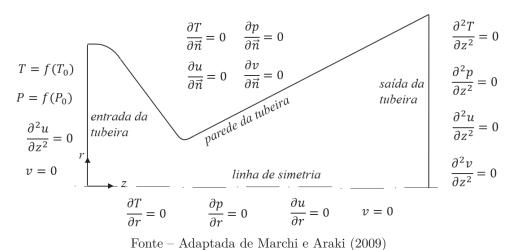
$$p = \rho RT, \tag{3.5}$$

onde R é a constante do gás no interior da tubeira dado em J/(kg.K).

3.2.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições de contorno definidas conforme Marchi e Araki (2009) são mostradas a seguir na Figura 7. As equações a serem apresentadas em coordenadas cilíndricas, onde z e r são as direções axial e radial respectivamente.

Figura 7 – Condições de contorno em coordenadas cilíndricas.



• Entrada (ou contorno oeste): a temperatura T e a pressão p dos gases de combustão na entrada da tubeira são tomadas como funções das propriedades de estagnação,

ou seja, T_0 , p_0 ; a velocidade axial u na entrada é extrapolação linear da velocidade no interior da câmara; a velocidade radial v é nula:

$$\begin{cases}
T = f(T_0); & p = f(p_0); \\
\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0; & v = 0.
\end{cases}$$
(3.6)

• Parede (ou contorno norte): parede adiabática, impermeável, com deslizamento (invíscido). Considera-se que \vec{n} é o vetor normal unitário;

$$\begin{cases}
\frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0; & \frac{\partial p}{\partial \vec{n}} = 0; \\
\frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = 0; & \frac{\partial v}{\partial \vec{n}} = 0.
\end{cases}$$
(3.7)

• Saída (ou contorno leste): a solução do escoamento em tubeiras não requer condição de contorno na saída pois que o escoamento é supersônico nessa região. Entretanto para a implementação do modelo numérico, há necessidade da especificação das condições de contorno. Sendo assim, a temperatura T, pressão P, velocidades axial u e radial v são tomadas como extrapolações lineares dessas propriedades para os valores encontrados no interior da tubeira:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0; & \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = 0; \\ \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0; & \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} = 0. \end{cases}$$
(3.8)

• Linha de simetria: impermeável, adiabática.

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0, \ \frac{\partial p}{\partial r} = 0, \ \frac{\partial u}{\partial r} = 0, \ v = 0.$$
 (3.9)

Os coeficientes e termos fontes resultantes da aplicação das condições de contorno podem ser vistos no Apêndice D.

3.3 MODELO NUMÉRICO

O escoamento do fluido no interior da tubeira será resolvido numericamente com MVF, que possui como característica básica a integração das equações diferenciais na forma conservativa sobre um volume de controle (MALISKA, 2017). Nesse método, as variáveis de interesse são armazenadas no centro geométrico do volume de controle (centroide), sendo que as expressões algébricas utilizadas para discretizar o modelo matemático são avaliadas

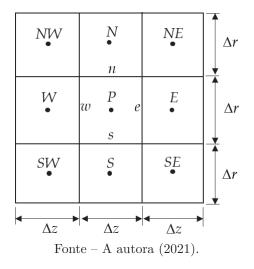
nas faces dos volumes de controle (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007; FERZIGER; PERIC, 2012).

Dentre as características que definem o modelo numérico pode-se citar o tipo da malha, o método numérico (nesse caso, o MVF), tipos de aproximações numéricas, solver, entre outras. A seguir são mostradas as características que definem o modelo numérico usado no presente trabalho.

3.3.1 CONSTRUÇÃO DA MALHA

A malha é essencialmente a representação do domínio em forma discreta. A subdivisão do domínio em subdomínios permite que a solução seja obtida em número finito de regiões, denominados volumes elementares (FERZIGER; PERIC, 2002). Cada volume elementar possui o ponto central "P" local, onde as variáveis de interesse são calculadas. As faces do volume são identificadas com os pontos cardeais "n", "s", "e" e "w", conforme a Figura 8. Nesse esquema a malha é uniforme, ou seja, os volumes possuem as mesmas dimensões Δz e Δr .

Figura 8 – Esquema de volume elementar em malha bidimensional uniforme.



Devido à forma geométrica da tubeira, a malha utilizada é do tipo não-ortogonal estruturada (curvilínea) e com arranjo co-localizado de variáveis, ou seja, todas as propriedades utilizam o mesmo volume elementar. Nesse tipo de malha, faz-se a transformação do sistema de coordenadas axissimetrico (z e r) para sistema de coordenadas generalizado (ξ e η), com objetivo de mapear o domínio físico em um domínio computacional conforme mostra a Figura 9. Os pontos nodais são facilmente localizados por índices i e j.

 $\eta(z,r)$ $\xi(z,r)$

Figura 9 – Esquema de volume elementar em malha bidimensional uniforme.

Fonte – Adaptado de Maliska (2017)

Após a geração da malha, cada volume é indexado em único índice P, em termos das variáveis i e j, que representam respectivamente a coluna e a linha de volumes. A expressão a seguir é utilizada para isso:

$$P = (n_z)j + i. (3.10)$$

onde n_z é o número de volumes na horizontal, i é o índice da coluna ξ e j é o índice da coluna η . A Fig. 10 mostra esquema de malha numerada com único índice no sistema transformado ξ e η .

Figura 10 – Volumes indexados na malha ortogonal.

η						
	21	22	23	24	25	
	16	17	18	19	20	
	11	12	13	14	15	
	6	7	8	9	10	
	1	2	3	4	5	
						ξ

Fonte – A autora (2021).

Após estabelecer a malha no plano transformado, deve-se especificar a estratégia utilizada para a aplicação das condições de contorno. As mesmas são inseridas através de volumes fictícios (MALISKA, 2017). Os volumes fictícios possuem a vantagem de facilitar a implementação das condições de contorno, entretanto têm a desvantagem de aumentar

em duas colunas e duas linhas de volumes a serem indexados e portanto a quantidade de equações a serem resolvidas também aumenta. Para indexar os volumes, levando em conta os fictícios, a Eq. 3.10 torna-se:

$$P = (n_z + 2)(j - 1) + i. (3.11)$$

onde n_z é o número de volumes reais na horizontal, i é o índice da linha e j é o índice da coluna. Dessa forma surge a nomenclatura aos volumes que são do volume físico, que recebem o nome de volumes reais, e aos volumes das condições de contorno, que são chamados fictícios.

3.3.2 EQUAÇÕES EM COORDENADAS GENERALIZADAS

O sistema de coordenadas generalizado (ou transformado) relaciona-se com o sistema de coordenadas cilíndricas z e r da seguinte maneira (TANNEHILL $et\ al.$, 1997):

$$z = z(\eta, \xi),$$

$$r = r(\eta, \xi).$$
(3.12)

Com a utilização das Eq. 3.12 as equações de balanço da massa e de quantidade de movimento (as equações 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4) se tornam:

• Equação de balanço da massa:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial\left(\rho r U\right)}{\partial \xi} + \frac{1}{r}\frac{\partial\left(\rho r V\right)}{\partial \eta} = 0,\tag{3.13}$$

onde U e V são as componentes contravariantes do vetor velocidade dados por:

$$U = ur_{\eta} - vz_{\eta},$$

$$V = vz_{\xi} - ur_{\xi},$$
(3.14)

• Equação da quantidade de movimento linear em z:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial\left(\rho r U u\right)}{\partial \xi} + \frac{1}{r}\frac{\partial\left(\rho r V u\right)}{\partial \eta} = \frac{\partial p}{\partial \eta} r_{\xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} r_{\eta}.$$
(3.15)

• Equação da quantidade de movimento linear em r:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial\left(\rho rUv\right)}{\partial\xi} + \frac{1}{r}\frac{\partial\left(\rho rVv\right)}{\partial\eta} = \frac{\partial p}{\partial\xi}z_{\eta} - \frac{\partial p}{\partial\eta}z_{\xi},\tag{3.16}$$

onde J é o jacobiano da transformação dado por:

$$J = [z_{\xi}r_{\eta} - z_{\eta}r_{\xi}]^{-1}. \tag{3.17}$$

• Equação da energia:

$$\frac{c_p}{r} \frac{\partial \left(\rho r U T\right)}{\partial \xi} + \frac{c_p}{r} \frac{\partial \left(\rho r V T\right)}{\partial \eta} = \frac{1}{J} \frac{\partial p}{\partial t} - u \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} r_{\xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} r_{\eta}\right) - v \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} z_{\eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} z_{\xi}\right)$$
(3.18)

No MVF (TANNEHILL et al., 1997) a discretização é realizada pela integração das equações 3.13, 3.15, 3.16 e 3.18 sobre volume de controle arbitrário. As expressões resultantes representam o fluxo da propriedade de interesse ou de suas derivadas através das faces do volume de controle. Então, para o sistema de coordenadas transformadas, tem-se:

$$\int_{t-\Delta t}^{t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \int_{\xi_w}^{\xi_e} 2\pi r \Phi \, d\xi \, d\eta \, dt', \qquad (3.19)$$

onde Φ é o termo a ser integrado. Adotou-se a regra do retângulo para integração espacial e aplicou-se a aproximação totalmente implícita para a integração temporal (FERZIGER; PERIC, 2012). A solução desejada é de regime permanente e o intervalo de tempo é utilizado apenas como parâmetro de relaxação. Mas o intervalo de tempo Δt tem papel importante: se Δt for pequeno, o número de iterações até atingir o regime permanente pode ser muito grande, enquanto que, se Δt for grande, a solução diverge.

As equações (massa, quantidade de movimento nas direções axial e radial) são discretizadas utilizando-se funções de interpolação de primeira ordem (UDS) ou de primeira ordem com correção adiada. Considere que $\Phi=1$ para a conservação da massa, $\Phi=u$ para a velocidade axial, $\Phi=v$ para a velocidade radial e o índice $^{\circ}$ indicando o valor do intervalo de tempo anterior, tem-se:

$$\left[\frac{(\mathcal{M}_{P\Phi P}) - (\dot{\mathcal{M}}_{P\Phi P})^{\circ}}{\Delta t} + \frac{\mathcal{M}_{e\Phi e} - \mathcal{M}_{w\Phi w}}{\Delta \xi} + \frac{\mathcal{M}_{n\Phi n} - \mathcal{M}_{s\Phi s}}{\Delta \eta} \right] = r_{P} P_{P}^{\Phi},$$
(3.20)

onde

$$\Delta \xi = \xi_e - \xi_w, \Delta \eta = \eta_n - \eta_s,$$
 (3.21)

$$\mathcal{M}_{P} = \left(\frac{\rho r}{J}\right)_{P},
\dot{\mathcal{M}}_{e} = (\rho r U)_{e},
\dot{\mathcal{M}}_{w} = (\rho r U)_{w},
\dot{\mathcal{M}}_{n} = (\rho r V)_{n},
\dot{\mathcal{M}}_{s} = (\rho r V)_{s}.$$
(3.22)

Os valores de P^{Φ} da Eq. 3.20 são dados por:

$$P_P^1 = 0,$$

$$P_P^u = \frac{(pr\xi)_n - (pr\xi)_s}{\Delta \eta} - \frac{(pr\eta)_e - (pr\eta)_w}{\Delta \xi},$$

$$P_P^v = \frac{(pz\eta)_e - (pz\eta)_w}{\Delta \xi} - \frac{(pz\xi)_n - (pz\xi)_s}{\Delta \eta}$$
(3.23)

São utilizadas para calcular as derivadas nas faces de cada volume de controle as seguintes expressões para os termos nas faces:

$$\Phi_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right)\Phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right)\Phi_E,\tag{3.24}$$

$$\Phi_w = \left(\frac{1}{2} + \alpha_w\right)\Phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w\right)\Phi_P,\tag{3.25}$$

$$\Phi_n = \left(\frac{1}{2} + \alpha_n\right)\Phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_n\right)\Phi_N,\tag{3.26}$$

$$\Phi_s = \left(\frac{1}{2} + \alpha_s\right)\Phi_S + \left(\frac{1}{2} - \alpha_s\right)\Phi_P,\tag{3.27}$$

onde:

$$\alpha_e = \frac{1}{2} \operatorname{sign}(U_e), \tag{3.28}$$

$$\alpha_w = \frac{1}{2} \operatorname{sign}(U_w), \tag{3.29}$$

$$\alpha_n = \frac{1}{2} \operatorname{sign}(V_n), \tag{3.30}$$

$$\alpha_s = \frac{1}{2} \operatorname{sign}(V_s), \tag{3.31}$$

onde sign() retorna o sinal do argumento.

Tendo em mãos as Eqs. 3.24 a 3.31 e as aproximações para derivadas, substitui-se as mesmas nas equações discretizadas, obtendo em seguida um sistema linear para cada equação de balanço de propriedades, onde cada pode ser escrita de forma geral (MALISKA, 2017) conforme mostra a Eq. 3.32:

$$a_{P}\Phi_{P} = a_{w}\Phi_{W} + a_{e}\Phi_{E} + a_{s}\Phi_{S} + a_{n}\Phi_{N} + + a_{sw}\Phi_{SW} + a_{nw}\Phi_{NW} + a_{se}\Phi_{SE} + a_{ne}\Phi_{NE} + b_{P},$$
(3.32)

onde a representa os coeficientes das equações de balanço discretizadas relacionados ao volume de controle P e aos seus vizinhos e b_P o termo fonte dessas equações.

Das equações de quantidade movimento linear são obtidas as expressões para a determinação das velocidades nodais nas direções axial e radial. Com o uso de formulação adequada para qualquer regime de velocidade (subsônico, transônico ou supersônico) obtém-se as componentes da velocidade em toda a tubeira desde a entrada até a saída. No Apêndice B são mostrados os valores dos coeficientes da Eq. 3.32.

3.3.3 CORREÇÃO DA PRESSÃO

A Eq. 3.32 é a forma geral do sistema linear obtido para cada equação de balanço de propriedades. Portanto a Eq.3.32 consiste no conjunto de equações escrita para o único volume. Para fechamento deste conjunto utiliza-se a equação de estado, Eq. 3.5.

A literatura apresenta basicamente duas maneiras de se resolver os sistemas de equações algébricas lineares, a forma segregada e a forma acoplada (MALISKA, 2017). A solução acoplada resolve um só sistema de equações lineares, composto de massa, energia e quantidade de movimento (FERZIGER; PERIC, 2002). Esse método de resolução resulta em alto custo computacional, devido ao tamanho da matriz obtida. A solução segregada resolve um sistema por vez, tendo a desvantagem de ampliar o problema dos acoplamentos entre as variáveis devido a não linearidade das equações. Ao resolver de forma segregada, é necessário tratar o acoplamento pressão-velocidade. Conforme explica Maliska (2017), não é possível obter o valor da pressão a partir das equações do movimento de modo que as componentes do vetor velocidade satisfaçam a equação da continuidade. Para resolver esse problema, propõem-se um algoritmo onde um valor de pressão é proposto, e através de processo iterativo, este valor esteja corrigido com os valores das velocidades que são obtidos pelas equações de conservação da quantidade de movimento.

Para o caso da solução do escoamento a qualquer regime de velocidade, em que são resolvidos ao mesmo tempo os campos de baixas velocidades (incompressível), quanto de altas velocidades (compressível), trata-se o acoplamento de pressão-velocidade e pressão-massa específica. Tem-se dessa maneira a formulação adequada para escoamento com baixas ou altas velocidades, o que possibilita obter o campo de velocidades para todo o

escoamento, e não só para a região supersônica (MARCHI; MALISKA, 1994). O fluxo de massa tem duas variáveis, velocidade e massa específica, que é uma não linearidade. Usando a face leste como exemplo, fluxo de massa é linearizado através de

$$\dot{m}_e = \{ (\rho^* U)_e + (\rho U^*)_e - (\rho^* U^*)_e \} \Delta \eta \Delta \xi, \tag{3.33}$$

e se o escoamento é de baixa velocidade, a massa específica é constante e o segundo e terceiro termos se anulam. Se o escoamento é de alta velocidade, a velocidade pode ser linearizada, de forma que o primeiro e o terceiro termo se cancelem. Tratando o acoplamento desta maneira, o problema é resolvido para todo o escoamento.

Existem vários métodos para se resolver o acoplamento pressão-velocidade. O método denominado SIMPLEC (Semi Implicit Linked Equations Consistent) é empregado no código computacional Mach2D. Esse método constitui-se em obter a pressão como a soma de uma estimativa p^* com uma correção de pressão p' (PATANKAR, 2018):

$$p = p^* + p'. (3.34)$$

Estimando um campo de pressão p^* , resolve-se as equações das componentes do vetor velocidade e também a equação de estado, obtendo respectivamente as componentes do vetor velocidade u^* e v^* e massa específica ρ^* . Ou seja:

$$\rho^* = \rho(p^*),$$
 $u^* = u(\rho^*),$
 $v^* = v(\rho^*).$
(3.35)

Estas componentes do vetor velocidade, u^* , v^* e a massa específica ρ^* não satisfazem a equação da continuidade. Então determina-se o desvio da pressão $p' = p - p^*$ a partir da pressão p que satisfaria a equação da continuidade. Obtém-se as componentes do vetor velocidade u, v e a massa específica ρ dadas em função deste desvio de pressão:

$$\rho = \rho(p')
 u = u(p')
 v = v(p').$$
(3.36)

A Eq. 3.36 é denominada pressão-massa específica e pressão-velocidade. Obtendo-se a massa específica ρ a partir da equação de estado (FERZIGER; PERIC, 2002; MALISKA, 2017), obtêm-se:

$$\rho = \frac{p^* + p'}{RT} \tag{3.37}$$

A Eq. 3.37 pode ser escrita em duas parcelas:

$$\rho^* = \frac{p^*}{RT},\tag{3.38}$$

$$\rho' = \frac{p'}{RT}. (3.39)$$

Os fluxos de massa devem ser avaliados sobre as faces dos volumes. Utilizando o esquema UDS para aproximação das variáveis sobre as faces, tem-se as seguintes expressões:

$$\rho_{e} = \rho_{e}^{*} + \rho'_{e},
\rho_{w} = \rho_{w}^{*} + \rho'_{w},
\rho_{n} = \rho_{n}^{*} + \rho'_{n},
\rho_{s} = \rho_{s}^{*} + \rho'_{s},$$
(3.40)

onde

$$\rho_e^* = \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_e\right)\rho_P^* + \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_e\right)\rho_E^*, \tag{3.41}$$

$$\rho_w^* = \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_w\right) \rho_W^* + \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_w\right) \rho_P^*, \tag{3.42}$$

$$\rho_n^* = \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_n\right) \rho_P^* + \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_n\right) \rho_N^*, \tag{3.43}$$

$$\rho_s^* = \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_s\right)\rho_S^* + \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_s\right)\rho_P^*,\tag{3.44}$$

e os termos de desvios de pressão nas faces são:

$$\rho_e' = \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_e\right) \left(\frac{p'}{RT}\right)_P + \left(\frac{1}{2} - \hat{\alpha}_e\right) \left(\frac{p'}{RT}\right)_E, \tag{3.45}$$

$$\rho_w' = \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_w\right) \left(\frac{p'}{RT}\right)_W + \left(\frac{1}{2} - \hat{\alpha}_w\right) \left(\frac{p'}{RT}\right)_P,\tag{3.46}$$

$$\rho_n' = \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_n\right) \left(\frac{p'}{RT}\right)_N + \left(\frac{1}{2} - \hat{\alpha}_n\right) \left(\frac{p'}{RT}\right)_N,\tag{3.47}$$

$$\rho_s' = \left(\frac{1}{2} + \hat{\alpha}_s\right) \left(\frac{p'}{RT}\right)_S + \left(\frac{1}{2} - \hat{\alpha}_s\right) \left(\frac{p'}{RT}\right)_P,\tag{3.48}$$

onde os termos $\alpha_e,\,\alpha_n,\,\alpha_w$ e α_s são dados pelas Eqs. 3.28 a 3.31.

Para resolver os fluxos nas faces para a equação da continuidade, Eq. 3.20, são necessárias as componentes do vetor velocidade u e v. A equação discretizada para as componentes u e v é dada por (MALISKA, 2017):

$$a_P^{\Phi}\Phi_P + \sum_{nh} a_{nh}^{\Phi}\Phi_{NB} = \frac{\mathcal{M}_P^{\circ}\Phi_P^{\circ}}{\Delta t} + r_P P_P^{\Phi}, \qquad \Phi \in u, v, \tag{3.49}$$

onde P^Φ_P é o termo da discretização do gradiente de pressão.

Realizando o mesmo procedimento utilizado para a massa específica, obtém-se a expressão para a velocidade a partir do campo de pressão estimado p^* , tem-se componentes do vetor de velocidades estimados.

$$a_P^{\Phi}\Phi_P^* + \sum_{nb} a_{nb}^{\Phi}\Phi_{NB}^* = \frac{\mathcal{M}_P^{\circ}\Phi_P^{\circ}}{\Delta t} + r_P(P_P^{\Phi})^*, \qquad \Phi \in \{u, v\}.$$
 (3.50)

Então, satisfazendo a equação da continuidade, tem-se um desvio da velocidade, subtraindo-se a Eq. 3.50 da Eq. 3.51 tem-se:

$$a_P^{\Phi}(\Phi_P - \Phi_P^*) + \sum_{nb} a_{nb}^{\Phi}(\Phi_{NB} - \Phi_{NB}^*) = \frac{\mathcal{M}_P^{\circ} \Phi_P^{\circ}}{\Delta t} + r_P[P_P^* - (P_P^{\Phi})^*], \quad \Phi \in \{u, v\}.$$
(3.51)

A aproximação SIMPLEC consiste em fazer:

$$\Phi_P' = \Phi_{NB}'. \tag{3.52}$$

O resultado é uma aproximação para as componentes $u \in v$ dadas por:

$$u_P = u_P^* + \frac{r_P(P_P^u)'}{a_P^u + \sum_{nb} a_{nb}^u}$$
(3.53)

е

$$v_P = v_P^* + \frac{r_P(P_P^v)'}{a_P^v + \sum_{nh} a_{nh}^v}.$$
 (3.54)

Para que exista o acoplamento entre velocidade e pressão efetivamente, é realizada a interpolação entre os elementos da equação de movimento, obtendo o valor das velocidades corrigidas nas faces dos volumes. A seguir, o procedimento de interpolação está aplicado para a face leste, mas pode ser estendido para outras bastando utilizar os valores adequados para cada face. Os passos a seguir foram transcritos de Bertoldo (2014).

As expressões para Φ_P e Φ_E nos centroides dos volumes são dadas por:

$$(a_P^{\Phi})_P \Phi_P + \left(\sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} \Phi_{NB}\right)_P = \frac{\mathcal{M}_P^{\circ} \Phi_P^{\circ}}{\Delta t} + r_P P_P^{\Phi}, \quad \Phi \in \{u, v\},$$
 (3.55)

е

$$(a_P^{\Phi})_E \Phi_E + \left(\sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} \Phi_{NB}\right)_E = \frac{\mathcal{M}_E^{\circ} \Phi_E^{\circ}}{\Delta t} + r_E P_E^{\Phi}, \quad \Phi \in \{u, v\},$$
 (3.56)

onde $r_P P_P^{\Phi}$ e $r_E P_E^{\Phi}$ são termos de aproximação do gradiente de pressão, disponíveis no apêndice B.

Somando as Eqs. 3.55 e 3.56 e aplicando as seguintes aproximações:

$$(a_P^{\Phi})_P \Phi_P + (a_P^{\Phi})_E \Phi_E = [(a_P^{\Phi})_P + (a_P^{\Phi})_E] \Phi_E, \tag{3.57}$$

$$(a_P^{\Phi})_P \Phi_P + (a_P^{\Phi})_E \Phi_E = [(a_P^{\Phi})_P + (a_P^{\Phi})_E] \Phi_E, \tag{3.58}$$

$$\mathcal{M}_P^{\circ} \Phi_P^{\circ} + \mathcal{M}_E^{\circ} \Phi_E^{\circ} = [\mathcal{M}_P^{\circ} + \mathcal{M}_E^{\circ}] \Phi_e^{\circ}, \tag{3.59}$$

$$r_P P_P^{\Phi} + r_E P_E^{\Phi} = r_e P_e^{\Phi},$$
 (3.60)

resulta em

$$[(a_P^{\Phi})_P + (a_P^{\Phi})_E]\Phi_e + \left(\sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} \Phi_{NB}\right)_P + \left(\sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} \Phi_{NB}\right)_E = \frac{\mathcal{M}_P^{\circ} + \mathcal{M}_E^{\circ}}{\Delta t} \Phi_e^{\circ} + 2r_e(P_e^{\Phi})^*, \quad \Phi \in \{u, v\}.$$
(3.61)

A expressão da correção da velocidade $\Phi'_e = \Phi_e - \Phi^*_e$ é obtida subtraindo-se a Eq. 3.61 da Eq. 3.60. Tem-se,

$$\left[(a_P^{\Phi})_P (\Phi_e - \Phi_e^*) \right] + \left[(a_P^{\Phi})_E (\Phi_e - \Phi_e^*) \right] + \left[\sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} (\Phi_{NB} - \Phi_{NB}^*) \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} (\Phi_{NB} - \Phi_{NB}^*) \right]_E =$$

$$2r_e \left[(P_e^{\Phi}) - (P_e^{\Phi})^* \right], \quad \Phi \in \{u, v\}, \tag{3.62}$$

e utilizando a aproximação do SIMPLEC $\Phi'_{NB} = \Phi'_e$ e escrevendo $(P_e^{\Phi})' = P_e^{\Phi} - (P_e^{\Phi})^*$, obtém-se:

$$\left[\left(a_P^{\Phi} + \sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} \right)_P + \left(a_P^{\Phi} + \sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} \right)_E \right] \Phi_e' = +2r_e(P_e^{\Phi})', \quad \Phi \in \{u, v\}, \quad (3.63)$$

isolando-se Φ_e , tem-se

$$\Phi_e = \Phi_e^* + \frac{2r_e(P_e^{\Phi})'}{[(a_P^{\Phi} + \sum_{nb} a_{nb}^{\Phi})_P + (a_P^{\Phi} + \sum_{nb} a_{nb}^{\Phi})_E]}, \quad \Phi \in \{u, v\},$$
 (3.64)

e isolando-se Φ_e^* na Eq. 3.61

$$\Phi_{e}^{*} = \frac{\mathcal{M}_{P}^{\circ} + \mathcal{M}_{E}^{\circ}}{\frac{\Delta t}{\Delta t} - \left(\sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} \Phi_{NB}^{*}\right)_{P} - \left(\sum_{nb} a_{nb}^{\Phi} \Phi_{NB}^{*}\right)_{E}}{(a_{P}^{\Phi})_{P} + (a_{P}^{\Phi})_{E}} = + \frac{2r_{P}\bar{S}_{P}^{\Phi} + 2r_{E}\bar{S}_{E}^{\Phi} + 2r_{e}\left(P_{e}^{\Phi}\right)^{*}}{(a_{P}^{\Phi})_{P} + (a_{P}^{\Phi})_{E}}, \quad \Phi \in \{u, v\},$$
(3.65)

A aproximação do termo $(P_e^{\Phi})^*$ com $\Phi \in \{u,v\}$ na Eq. 3.65 é dada por:

$$(P_e^u)^* = \left[r_\xi \frac{\partial p^*}{\partial \eta} - r_\eta \frac{\partial p^*}{\partial \xi} \right]_e = (r_\xi)_e \frac{p_{NE}^* + p_N^* - p_{SE}^* - p_S^*}{4\Delta \eta} - (r_\eta)_e \frac{p_E^* - p_P^*}{\Delta \xi}$$
(3.66)

$$(P_e^v)^* = \left[z_\eta \frac{\partial p^*}{\partial \xi} - z_\xi \frac{\partial p^*}{\partial \eta} \right]_e = (z_\eta)_e \frac{p_E^* - p_P^*}{\Delta \xi} - (z_\eta)_e \frac{p_{NE}^* + p_N^* - p_{SE}^* - p_S^*}{4\Delta \eta}$$
(3.67)

Para obter a correção da pressão $(P_e^{\Phi})'$ substitui-se p^* por p' para obter as equações para $P_e^{\Phi'}$. Segundo Maliska (2017) apud Bertoldo (2014) o termo $(\frac{\partial p'}{\partial \eta})_e$ pode ser desprezado. Então, o acoplamento pressão-velocidade para componentes do vetor velocidade nas faces são dados por

$$u_e = u_e^* + u_e',$$

 $v_e = v_e^* + v_e',$ (3.68)

onde os termos de correção da velocidade são:

$$u'_{e} = d'_{e}(p'_{P} - p'_{E}), v'_{e} = d'_{e}(p'_{E} - p'_{P}),$$
(3.69)

onde os termos d_e^u e d_e^v são:

$$d_e^u = \frac{2r_e(r_\eta)_e/\Delta\xi}{(a_P^u + \sum_{nb} a_{nb}^u)_P + (a_P^u + \sum_{nb} a_{nb}^u)_E},$$
(3.70)

$$d_e^v = \frac{2r_e(z_\eta)_e/\Delta\xi}{(a_P^u + \sum_{nb} a_{nb}^v)_P + (a_P^v + \sum_{nb} a_{nb}^v)_E}.$$
 (3.71)

As componentes do vetor velocidade nas faces, devido às componentes contravariantes também são obtidas através da correção de pressão com o procedimento similar às componentes u_e e v_e :

$$U_e = U_e^* + U_e', U_w = U_w^* + V_w'.$$
(3.72)

Utilizando por base a expressões Eq. 3.14, as componentes do vetor velocidade contravariante para o campo estimado de pressão (p^*) são dadas por:

$$U_e^* = u_e^*(r_\eta)_e - v_e^*(z_\eta)_e, U_w^* = u_w^*(r_\eta)_w - v_w^*(z_\eta)_w.$$
(3.73)

e, as componentes do vetor velocidade contravariantes devido ao desvio da pressão (p')são:

$$U'_{e} = d_{e}^{U}(p'_{P} - p'_{E}),$$

$$V'_{e} = d_{e}^{V}(p'_{E} - p'_{P}),$$
(3.74)

e os coeficientes do SIMPEC, os termos d, são dados por:

$$d_e^U = d_e^u(r_\eta)_e + d_e^v(z_\eta)_e, d_w^U = d_w^u(r_\eta)_w + d_w^v(z_\eta)_w.$$
(3.75)

Até esse momento, os acoplamentos pressão-velocidade e pressão-massa específica dependem do campo estimado p^* para obter o desvio da pressão p', a partir da pressão que satisfaz a equação da continuidade. Esta equação contém os termos que representam os fluxos Eq. 3.20 e precisam ser calculados sobre as faces dos volumes. Como se tratam de produtos entre duas variáveis (ρ e as componentes do vetor velocidade), há necessidade de linearização. Finalmente as expressões obtidas para correção de pressão p' conduzem a um sistema linear dado por:

$$a_P^{p'}p'_P + a_n^{p'}p'_W + a_e^{p'}p'_E + a_s^{p'}p'_S + a_n^{p'}p'_N + b_P^{p'} = 0. (3.76)$$

As expressões dos coeficientes deste sistema são mostrados no Apêndice C. Os coeficientes e termos fontes para resultantes da aplicação das condições de contorno são mostrados no Apêndice D.

3.3.4 ALGORITMO

O algoritmo do programa computacional Mach2D segue os seguintes passos:

Tabela 3 – Algoritmo do programa Mach2D:

Algoritmo:

- 1. Leitura dos dados $(P_0, T_0, \text{ número de iterações, } \Delta t, \text{ etc});$
- 2. Leitura de dados da geometria da tubeira (spline cúbico);
- 3. Geração da malha;
- 4. Cálculo das métricas de transformação de coordenadas;
- 5. Estimativa inicial dos campos de T, p, e u (valores da solução quase unidimensional) e v; **Para** cada espaço de tempo **faça**
 - 6. Atualiza campos no tempo $t + \Delta t$;
 - 7. Cálculo dos coeficientes e termos fonte para a QML em z, solucionando o sistema gerado através do MSI;
 - 8. Cálculo dos coeficientes e termos fonte para a QML em r, solucionando o sistema gerado através do MSI;
 - 9. Cálculo das velocidades u e v e das velocidades contravariantes (U e V) nas faces;
 - 10. Cálculo dos coeficientes do SIMPLEC;

Para as n_{it} iterações do ciclo da massa faça

- 11. Calcula os coeficientes e fontes para correção de pressão, a'_p b'_p ;
- 12. Resolve sistema linear para obter p';
- 13. Corrige as variáveis com p';
- 14. Cálculo dos coeficientes e termos fonte para a temperatura T, solucionando o sistema gerado através do MSI;
- 15. Cálculo da massa específica;
- 16. Pós-processamento.

FIM

3.4 PÓS-PROCESSAMENTO

A partir da resolução do escoamento, pode-se obter o valor de parâmetros de eficiência de tubeiras. O vácuo foi utilizado como pressão ambiente.

1. Empuxo no vácuo (F_v)

O empuxo no vácuo F_v , pode ser definido como a força exercida pelo sistema de propulsão do foguete sobre o veículo, ou como a troca de quantidade de movimento

linear entre os gases e o veículo (SUTTON; BIBLARZ, 2016). O empuxo no vácuo, F_v , é dado por:

$$F_v = \int_{S_{exit}} (\rho u^2 + p) dS, \tag{3.77}$$

onde ρ é a massa específica $[kg/m^3]$, u é a velocidade axial [m/s], p é a pressão [Pa] e S é a área em m^2 e S_{exit} é a área de exaustão da tubeira.

2. Vazão mássica (\dot{m})

A vazão mássica \dot{m} é dada por:

$$\dot{m} = \int_{S_{exit}} (\rho u) dS. \tag{3.78}$$

3. Coeficiente de empuxo no vácuo (C_{fv})

O coeficiente de empuxo no vácuo é um parâmetro adimensional que avalia a qualidade da geometria de uma tubeira (C_{fv}) . É definido como a relação entre o empuxo (F_v) e o produto entre a pressão de estagnação (P_0) e a área de garganta (S^*) (SUTTON; BIBLARZ, 2016; TURNER, 2008):

$$C_{fv} = \frac{F_v}{P_0 S^*}. (3.79)$$

Como comentado anteriormente, o principal objetivo da pressente tese é a obtenção do perfil de tubeira que maximiza o coeficiente de empuxo no vácuo (C_{fv}) , portanto, C_{fv} é a função objetivo (F.O.).

4. Coeficiente de descarga (C_d)

O coeficiente de descarga C_d é definido como o quociente entre a vazão mássica real (ou calculada) e a vazão mássica ideal dos gases de combustão, sendo obtida através da seguinte expressão (SUTTON; BIBLARZ, 2016; TURNER, 2008):

$$C_d = \frac{\dot{m}_{real/calculado}}{\dot{m}_{ideal}}. (3.80)$$

5. Impulso específico (I_s)

O impulso específico é dado por (SUTTON; BIBLARZ, 2016; TURNER, 2008):

$$I_s = \frac{Ft_q}{m_p g},\tag{3.81}$$

onde F é a força de empuxo [N], t_q é o tempo de queima e g é a aceleração da gravidade.

A determinação das variáveis citadas anteriormente permite a comparação dos resultados da tese com os dados da literatura. Outras análises poderão ser realizadas através de gráficos de campos de temperatura, velocidade, pressão, número de Mach e massa específica.

6. Número de Mach (M).

Considere o número de Mach (ANDERSON, 1990), o parâmetro que relaciona a velocidade do som local (c) e a velocidade do escoamento (u), ou seja:

$$M = \frac{u}{c},\tag{3.82}$$

onde c é dada por

$$c = \sqrt{\gamma RT},\tag{3.83}$$

sendo T a temperatura local [K], R a constante do gás [J/kg.K], γ é definido como o quociente entre o calor específico a pressão constante (c_p) e o calor específico a volume constante (c_v) , ou seja,

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}.\tag{3.84}$$

3.5 OTIMIZAÇÃO

Otimização é uma importante ferramenta na ciência para tomada de decisão e análise de sistemas físicos. Para fazer uso de tal ferramenta é necessário identificar o objetivo (ou função objetivo F.O.), ou seja, uma quantidade que mensura o desempenho do sistema em estudo. O objetivo (no presente trabalho, a F.O. é o coeficiente de empuxo no vácuo, C_{fv}) depende certas características do sistema, denominadas variáveis. A otimização se propõe obter valores para as variáveis que otimizam o objetivo. Em termos matemáticos, um problema de otimização pode ser expresso por (NOCEDAL; WRIGHT, 2006):

$$\min_{z \in R^n} f(z) \text{ sujeito a } \begin{cases} c_i(z) = 0 & i \in \varepsilon, \\ c_i(z) \ge 0, & i \in \iota. \end{cases}$$
(3.85)

onde x é o vetor de variáveis $z_1, z_2, z_3, ..., f(z)$ é a função objetivo (F.O.), c_i é o vetor das restrições, ι e ε são intervalos do índice i.

A resolução bem sucedida de problemas de otimização requer que eles sejam modelados apropriadamente. O processo de modelagem consiste em se identificar a função objetivo (ou ainda objetivo ou função custo), as variáveis de projeto, as restrições e soluções viáveis (ARORA, 2004). A seguir, uma breve descrição dos termos relacionados ao processo de modelagem:

- 1. Função objetivo (F.O.): é a quantidade que mensura a performance do sistema em estudo. Em um sistema pode ser lucro, energia potencial ou combinação de quantidades que pode ser representada por apenas um número. Em termos matemáticos, é função de uma ou mais variáveis que se deseja maximizar (ou minimizar);
- 2. Variáveis de projeto: são variáveis que descrevem o sistema estudado. Em um problema de otimização deseja-se obter valores para as variáveis de projeto que otimizam a F.O. É desejável que as variáveis sejam independentes uma das outras, se isso não ocorre deve haver restrições entre elas;
- Restrições: são funções de igualdade ou desigualdade que dependem das variáveis de projeto. Podem existir restrições lineares ou não lineares;
- 4. Conjunto de soluções viáveis: é o conjunto de variáveis de projeto que podem representar a solução real para o problema estudado. Não fazem parte desse conjunto variáveis que produzam soluções com valores incoerentes fisicamente (por exemplo, raio negativo).

Após a modelagem do problema, o algoritmo de otimização pode ser usado para que a solução seja encontrada. Não existe apenas um método que possa resolver eficientemente todos os problemas de otimização, pelo contrário, existem vários métodos desenvolvidos para diferentes tipos de problemas de otimização. O método de otimização a ser utilizado no presente trabalho será o de otimização de forma, definido por Haslinger et al. (2003) como o método em que se deseja obter características (variáveis) que quando aplicadas ao modelo matemático (que descreve o comportamento do sistema) propiciem propriedades ótimas.

3.5.1 FUNÇÃO OBJETIVO

No presente trabalho deseja-se maximizar o coeficiente de empuxo de motor-foguete C_{fv} , portanto a função objetivo pode ser escrita como:

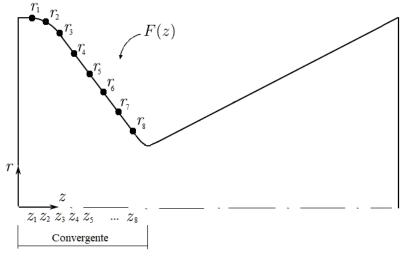
$$C_{fv}(\mathbf{r}) \tag{3.86}$$

onde \mathbf{r} é o vetor de variáveis $\mathbf{r} = \{r_1, r_2, ... r_N\}$, sendo, portanto, o conjunto de ordenadas dos pontos do sistema de coordenadas z_i e r_i que determinam a forma otimizada; $C_{fv}(\mathbf{r})$

é o coeficiente de empuxo no vácuo, sendo obtido a partir do perfil geométrico e N é o número de variáveis. A expressão para a função objetivo C_{fv} é descrita conforme Eq. 3.79 na seção de pós-processamento, seção 3.4.

O perfil geométrico por sua vez é estabelecido a partir das variáveis de projeto, \mathbf{r} , por interpolação. Existem várias formas para interpolar uma curva com base nas variáveis, tal como através de splines e mínimos quadrados. Neste trabalho propõe-se a utilização de spline cúbica. Deve-se notar que a forma com que as variáveis de projeto são interpoladas interfere no resultado de C_{fv} . Denominando a forma geométrica gerada pelo polinômio interpolador pela função F(z), tem-se que o problema de otimização de forma consiste em determinar F(z) que maximize C_{fv} . Os valores da função r_i são ordenadas dos pontos coordenados (z_i, r_i) , conforme mostra a Fig. 11. Na figura, o número de variáveis N é igual a oito. Deve-se notar que a geometria da tubeira será formada a partir de dados discretos (z_i, r_i) e que z_i são mantidas constantes e r_i são as variáveis do problema, que pertencerão ao perfil F(z). O perfil F(z) por sua vez é determinado por spline cúbica conforme será visto na Seção 3.5.2 a seguir.

Figura 11 – Função F(z), interpolada por spline cúbica e variáveis de projeto r_i .



Fonte – A autora (2021).

3.5.2 REPRESENTAÇÃO MATEMÁTICA DA GEOMETRIA

Na Seção 3.5.1 foi apresentada a função objetivo. Na presente seção serão mostrados detalhes e formulação da spline cúbica interpolante (RUGGIERO; LOPES, 1997) utilizada na parametrização dos pontos que definem a geometria. A origem do nome spline vem da régua elástica (cujo nome é spline), usada em desenhos de engenharia, que pode ser curvada de forma a passar por um dado conjunto de pontos (z_i, r_i) . Sob certas hipóteses, a curva definida pela régua pode ser descrita aproximadamente como sendo uma função por partes, cada qual um polinômio cúbico, de tal forma que ela e suas duas primeiras

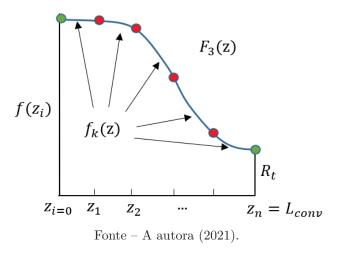
derivadas são contínuas sempre. A terceira derivada, entretanto, pode ter descontinuidades nos pontos z_i . Tal função é a spline cúbica interpolante com nós nos pontos z_i .

As funções splines podem ser lineares, quadráticas ou cúbicas. A spline linear apresenta a desvantagem de ter derivada primeira descontínua nos nós. As splines quadráticas, por sua vez, escritas como $F_2(z)$ tem derivadas contínuas até ordem 1 apenas e, portanto, a curvatura de $F_2(z)$ pode trocar nos nós. Por esta razão, as splines cúbicas são mais usadas.

Uma spline cúbica, $F_3(z)$, é a função polinomial por partes, contínua, onde cada parte, $f_k(z)$, é o polinômio de grau 3 no intervalo $[z_{k-1}, z_k]$, k = 1, 2, ..., n. $F_3(z)$ tem a primeira e segunda derivadas contínuas, o que faz com que a curva $F_3(z)$ não tenha picos e nem troque abruptamente de curvatura nos nós. A definição de spline cúbica interpolante pode ser escrita formalmente como (RUGGIERO; LOPES, 1997):

Suponha que f(z) esteja tabelada nos pontos z_i , i = 0, 1, 2, ..., n. A Fig. 12 ilustra os pontos z_i e $f(z_i)$. Nesta figura, L_{conv} é o comprimento do convergente e as variáveis são os pontos em vermelho, ou seja, N = 4 neste exemplo.

Figura 12 – Exemplo de pontos tabelados $(z_i, f(z_i))$ interpolados por spline cúbica.



A função $F_3(z)$ é chamada spline cúbica interpolante de f(z) nos nós z_i , i = 0, ..., n; se existem n polinômios de grau 3, $f_k(z)$, k = 1, ..., n tais que:

(i)
$$F_3(z) = f_k(z)$$
 para $z \in [z_{k-1}, z_k], k = 1, ..., n;$
(ii) $F_3(z_i) = f(z_i), i = 0, 1, ..., n;$
(iii) $f_k(z_k) = f_{k+1}(z_k), k = 1, 2, ..., (n-1);$
(iv) $f'_k(z_k) = f'_{k+1}(z_k), k = 1, 2, ..., (n-1);$
(v) $f''_k(z_k) = f''_{k+1}(z_k), k = 1, 2, ..., (n-1).$

Por simplicidade de notação, escreve-se:

$$f_k(z) = a_k(z - z_k)^3 + b_k(z - z_k)^2 + c_k(z - z_k) + d_k, \ k = 1, 2, ..., n.$$
(3.88)

Assim, o cálculo de $F_3(z)$ exige a determinação de 4 coeficientes para cada k, no total de 4n coeficientes: $a_1, b_1, c_1, d_1, a_2, b_2, ..., a_n, b_n, c_n, d_n$. Impondo as condições para que $F_3(z)$ seja spline interpolante de f em $z_0, ..., z_n$, tem-se:

(n+1) condições para que $F_3(z)$ interpole f(z) nos nós;

(n-1) condições para que $F_3(z)$ esteja bem definida nos nós (continuidade de $F_3(z)$ em $[z_0, z_n]$);

(n-1) condições para que $F_3'(z)$ seja contínua em $[z_0, z_n]$; e

(n-1) condições para que $F_3''(z)$ seja contínua em $[z_0, z_n]$, no total de (n+1+3(n-1))=4n-2 condições. Portanto tem-se duas condições em aberto.

Essas condições podem ser impostas de acordo com informações físicas do problema. De acordo com a definição dada para cada $f_k(z)$, a condição (i) da definição $F_3(z)$ está automaticamente satisfeita.

Para impor a condição (ii) monta-se, para k = 1, ..., n, as equações:

1. $f_k(z) = d_k = f(z_k)$, às quais deve-se acrescentar mais a equação:

$$f_1(z_0) = f(z_0) = -a_1 h_1^3 + b_1 h_1^2 - c_1 h_1 + d_1 = f(z_0),$$
 (3.89)

onde usa-se a notação $h_k = z_k - z_{k-1}$, com k = 1,

2. A condição (iii) é satisfeita através das (n-1) equações: para k=1,...,(n-1), $f_{k+1}(z_k)=f(z_k)$, ou seja:

$$-a_{k+1}h_{k+1}^3 + b_{k+1}h_{k+1}^2 - c_{k+1}h_{k+1} + d_1 = f(z_k), (3.90)$$

3. Para impor as condições (iv) e (v), usa-se as derivadas das $f_k(z)$:

$$f'_k(z) = 3a_k(z - zk)^2 + 2b_k(z - z_k) + c_k$$
(3.91)

$$f_k''(z) = 6a_k(z - z_k) + 2b_k. (3.92)$$

4. Observa-se que $f''_k(z_k) = 2b_k$. Assim cada coeficiente b_k pode ser escrito em função de $f''_k(z_k)$:

$$b_k = \frac{f_k''(z_k)}{2}. (3.93)$$

Analogamente, como $f''(z_{k-1}) = -6a_kh_k + 2b_k$, pode-se também escrever a_k em função das derivadas segundas nos nós, pois:

$$a_k = \frac{2b_k - f_k''(z_{k-1})}{6h_k} = \frac{f_k''(z_k) - f_k''(z_{k-1})}{6h_k}.$$
 (3.94)

5. E, impondo agora a condição (v), $f_k''(z_{k-1}) = f_{k-1}''(z_{k-1})$, obtém-se:

$$a_k = \frac{f_k''(z_k) - f_{k-1}''(z_{k-1})}{6h_k}. (3.95)$$

Observa-se que, no caso k=1, se introduz uma variável, $f''(z_0)$, arbitrária.

Uma vez que $d_k = f(z_k)$ e já se expressou a_k e b_k , pode-se usar as Eqs. 3.89 e 3.90 para determinar c_k também em função das derivadas segundas nos nós. Observa-se que tirar c_1 da Eq. 3.89 e, para k = 1, ..., (n-1) usar a Eq. 3.90 é o mesmo que, para k = 1, 2, ..., n, termos:

$$c_{k} = \frac{-f(z_{k-1}) - a_{k}h_{k}^{3} + b_{k}h_{k}^{2} + d_{k}}{h_{k}}$$

$$= \frac{f(z_{k}) - f(z_{k-1})}{h_{k}} - (a_{k}h_{k}^{2} - b_{k}h_{k})$$

$$= \frac{f(z_{k}) - f(z_{k-1})}{h_{k}} - \left\{ \frac{f_{k}''(z_{k}) - f_{k}''(z_{k-1})}{6h_{k}} - \frac{f_{k}''(z_{k})}{2}h_{k} \right\},$$
(3.96)

ou seja:

$$c_k = \frac{f(z_k) - f(z_{k-1})}{h_k} - \frac{-2f_k''(z_k)h_k - f_{k-1}''(z_{k-1}h_k)}{6},$$
(3.97)

Usando as notações $f_k''(z_k) = g_k$ e $f(z_k) = r_k$, tem-se que

$$a_k = \frac{g_k - g_{k-1}}{6h_k},\tag{3.98}$$

$$b_k = \frac{g_k}{2},\tag{3.99}$$

$$c_k = \left[\frac{r_k - r_{k-1}}{h_k} + \frac{2h_k g_k + g_{k-1} h_k}{6} \right], \tag{3.100}$$

$$d_k = r_k. (3.101)$$

Assim para k=1,2,...,n, pode-se calcular todos os coeficientes de $f_k(z)$ em função de $g_j=f''j(z_j),\ j=0,1,...,n$. Impondo agora a condição (iv) que ainda não foi utilizada, $f_k'(z_k)=f_{k+1}'(z_k), k=1,2,...,(n-1)$ tem-se:

$$f'k(z_k) = c_k = 3a_{k+1}h^2 - 2b_{k+1}h_{k+1} + c_{k+1}$$
(3.102)

Em que $c_{k+1} = ck - 3a_{k+1}h_{k+1}^2 + 2b_{k+1}h_{k+1}$. Usando as Eqs. 3.98, 3.99 e 3.100:

$$\frac{r_{k+1} - r_k}{h_{k+1}} + \frac{2h_{k+1}g_{k+1} + g_k h_{k+1}}{6} = \frac{r_k - r_{k-1}}{h_k} + \frac{2h_k g_k + g_{k-1}h_k}{6} - 3\left(\frac{g_{k+1} - g_k}{6}\right)h_{k+1} + 2\left(\frac{g_{k+1}h_{k+1}}{2}\right) \tag{3.103}$$

Agrupando os termos semelhantes, para k = 1, ..., n - 1,

$$\frac{1}{6} \left[h_k g_{k-1} \left(2h_k + 3h_{k+1} - h_{k+1} \right) g_k + \left(6h_{k+1} - 3h_{k+1} - 2h_{k+1} \right) g_{k+1} \right] =
= \frac{r_{k+1} - r_k}{h_{k+1}} - \frac{r_k - r_{k-1}}{h_k}$$
(3.104)

ou seja,

$$h_k g_{k-1} + 2(h_k + h_{k+1})g_k + h_{k+1}g_{k+1} = \frac{r_{k+1} - r_k}{h_{k+1}} - \frac{r_k - r_{k-1}}{h_k}, \tag{3.105}$$

que é um sistema de equações lineares com (n-1) equações (k=1,...,(n-1)) e (n+1) incógnitas: $g_0, g_1, ..., g_{n-1}, g_n$ e portanto, indeterminado, $\mathbf{Az} = \mathbf{b}$, onde $\mathbf{z} = (g_0, g_1, ..., g_n)^T$:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & & & \\ & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_4 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & h_{n-1} & 2(h_{n-1} + h_n) & h_n \end{pmatrix}_{(n-1)\times(n+1)}$$
(3.106)

е

$$\mathbf{b} = 6 \begin{pmatrix} \frac{r_2 - r_1}{h_2} - \frac{r_1 - r_0}{h_1} \\ \frac{r_3 - r_2}{h_3} - \frac{r_2 - r_1}{h_2} \\ \vdots \\ \frac{r_n - r_{n-1}}{h_n} - \frac{r_{n-1} - r_{n-2}}{h_{n-1}} \end{pmatrix}_{(n-1)\times(1)}$$

$$(3.107)$$

Para que esse sistema seja resolvido de forma única, deve-se impor mais duas condições. Uma alternativa, utilizada no presente trabalho é impor valores para as inclinações em cada extremo, por exemplo, $F'_3(z_0) = A$ e $F'_3(z_n) = B$ o que fornecerá as duas equações adicionais:

$$f_1'(z_0) = 3a_1h_2 - 2b_1h + c_1 = A', (3.108)$$

$$2b_1h + c_1 = A', (3.109)$$

sendo que, no presente trabalho utilizou-se A'=0 e B'=0.

No presente trabalho busca-se a otimização do coeficiente de empuxo no vácuo C_{fv} . Parte-se da consideração que C_{fv} depende da geometria, portanto, o mesmo pode ser escrito como $C_{fv}(\mathbf{r})$.

A otimização realiza-se através de processo iterativo, em que o conjunto de ordenadas $\mathbf{r} = r_1, r_2, ..., N$ é ajustado a cada iteração com base no valor de $C_{fv}(\mathbf{r})$ e N é o número de variáveis da otimização.

A seguir é apresentado um algoritmo que mostra em linhas gerais, como o procedimento de otimização é realizado:

- 1. São lidas as ordenadas r_i de acordo com abscissas z_i predefinidas;
- 2. O código computacional Mach2D recebe estas ordenadas e define-se a nova geometria por interpolação conforme discutido na Seção 3.5.2;
- 3. Resolve-se o escoamento e calcula-se C_{fv} ;
- 4. Verifica-se se a tolerância foi atingida e o problema foi solucionado. Se for, o processo é interrompido, caso contrário, o otimizador volta a propor novas ordenadas r_i e retorna ao passo 2.;

As novas ordenadas r_i , propostas a cada iteração (item 5 do algoritmo) são obtidas através do método de otimização contido em bibliotecas da linguagem Python. Portanto, o algoritmo principal é escrito em Python, o qual "chama" a solução do escoamento inúmeras vezes durante o processo de otimização. O otimizador utilizado no presente trabalho foi o SLSQP, cujas características são discutidas no Apêndice A.

A Figura 13 mostra o fluxograma com o processo de otimização. O primeiro passo mostra a leitura dos dados gerais de entrada, tal como critério de convergência, propriedades de estagnação, condições de contorno, entre outros. Nesse passo, ainda, os valores iniciais de **r** devem ser fornecidos. Em seguida, a geometria é definida por interpolação conforme

explicado na Seção 3.5.2. O terceiro passo consiste em gerar a malha. Depois disso, deve-se resolver o escoamento e finalmente obter o valor de C_{fv} . Caso o valor de C_{fv} esteja dentro da tolerância esperada o processo é interrompido, caso contrário, define-se novos valores para \mathbf{r} e o processo é repetido.

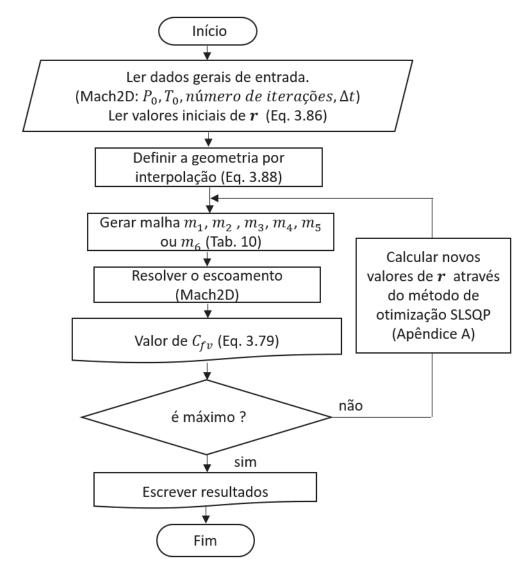


Figura 13 – Fluxograma do processo de otimização sem a técnica de MER.

O presente capítulo de Metodologia apresentou o modelo físico, matemático e numérico. Foram apresentados os detalhes do modelo numérico e o algoritmo utilizado pelo código computacional Mach2D. Foram apresentados os parâmetros de pós-processamento e também o método para a representação matemática da geometria. No próximo capítulo serão apresentados o processo de verificação de código e solução, etapas essenciais ao utilizar CFD.

4 VERIFICAÇÃO

Resolver problemas envolvendo escoamento de fluidos com uso de computador é uma prática permitiu a resolução de problemas sem solução analítica e geometrias complexas. Entretanto, resolver numericamente um problema significa obtê-lo de forma aproximada. Devido à sua natureza, problemas resolvidos numericamente, isto é, através de métodos numéricos, como por exemplo diferenças finitas ou volumes finitos, apresentam erros numéricos e de modelagem. Portanto, como tais erros são inerentes ao uso de CFD, o engenheiro ou pesquisador deve estar atento à necessidade de estimá-los.

O erro de modelagem é causado pelas simplificações feitas sobre o fenômeno real na concepção dos modelos matemáticos (ROACHE, 1998). O processo de se avaliar quão bem o modelo proposto se aproxima, de fato, do fenômeno físico dá-se o nome de Validação e será discutido no Capítulo 5. O erro de numérico, entretanto, está relacionado à acurácia da solução numérica para um dado modelo. Ao processo de se quantificar o quão bem a solução numérica obtida resolve um modelo proposto dá-se o nome de verificação e precede o processo de Validação. A verificação é ainda constituída pelos processos de verificação de código e verificação de solução (ASME, 2009). Ambos processos serão discutidas no presente capítulo.

A rigor, o erro numérico é causado por diversas fontes: erro de truncamento (ε_{τ}) , erro de iteração (ε_{η}) , erro de arredondamento (ε_{π}) e de programação (ε_{ϱ}) (FERZIGER; PERIC, 2002), que é representado por:

$$E(\phi) = E(\varepsilon_{\tau}, \varepsilon_{\eta}, \varepsilon_{\pi}, \varepsilon_{\varrho}), \tag{4.1}$$

onde ϕ é a variável de interesse genérica.

Os erros de arredondamento ocorrem devido à representação finita dos números reais nas computações, portanto estão relacionados ao número de algarismos usados para representar as variáveis nos computadores. Não podem ser evitados, mas podem ser reduzidos através da utilização da precisão dupla ou quádrupla (FORTUNA, 2000). De forma geral, esse tipo de erro aumenta com o número de operações envolvidas na computação da solução numérica, ou seja, ε_{π} aumenta com o refino da malha.

Erros de programação, segundo Roache (1998), podem ser resultantes do uso incorreto do modelo numérico na aproximação do modelo matemático, podem ser erros gerados durante a implementação do modelo matemático, erros cometidos durante o uso do programa computacional ou outro erro eventual. Para evitar erros dessa natureza é sugerido por diversos autores, (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007), (MALISKA, 2017), tal como implementar o código computacional em módulos, e testar cada módulo com problemas simples e resultados conhecidos entre outras práticas.

Erros de iteração são erros causados pelos processos iterativos, tais como métodos iterativos para resolução do sistema de equações algébricas resultante da discretização das equações governantes (FERZIGER; PERIC, 2002). Outros fatores que geram erros de iteração são a existência de não linearidades no modelo matemático, utilização de métodos multigrid, entre outros. Em geral, o erro de iteração diminui com o aumento do número de iterações. A forma de reduzi-lo é aumentar o número de iterações até que o erro de máquina seja alcançado.

Finalmente, erros de truncamento ocorrem devido à utilização de funções de interpolação truncadas, ou seja, não exatas. As funções de interpolação são utilizadas para aproximar os termos da equação diferencial. A estimativa do erro de truncamento pode ser feita a priori através da expansão de série de Taylor em torno de um ponto. O erro é o resíduo que resulta quando se substitui a expressão exata pela aproximação discretizada. O erro de truncamento pode ser representado pela forma geral do erro de truncamento (FERZIGER; PERIC, 2002):

$$\varepsilon_{\tau}(\phi) = c_1 h^{P_L} + c_2 h^{P_2} + c_3 h^{P_3} + c_4 h^{P_4} + \dots + c_n h^{P_n}, \tag{4.2}$$

onde os coeficientes c_i podem ser positivos ou negativos, função da variável dependente ou de suas derivadas, não podendo apenas ser função do tamanho dos elementos de malha h. Os expoentes de h são as ordens verdadeiras. Constituem-se em números inteiros positivos de uma série aritmética e seguem a relação $P_L < P_2 < P_3$ Por definição, o menor expoente de h na Eq. 4.2 é chamado de ordem assintótica P_L . É um número inteiro sempre maior ou igual a um. Pode-se notar que quando o tamanho dos elementos da malha h tende a zero o primeiro termo da Eq. 4.2 domina sobre os demais (MARCHI, 2001), (FERZIGER; PERIC, 2002).

É desejável que os erros de iteração, de arredondamento e de programação sejam minimizados ou inexistentes. Quando tais erros são desprezíveis, o erro numérico é causado apenas pelo erro de truncamento. Nesse caso, o erro numérico é chamado de discretização (E_h) (MARCHI, 2001). Nesse caso o erro numérico pode ser escrito como

$$E_h(\phi) = C_1 h^{P_L} + C_2 h^{P_2} + C_3 h^{P_3} + C_4 h^{P_4} + \dots + C_n h^{P_n}, \tag{4.3}$$

onde os coeficientes C_i são similares aos coeficientes c_i , ou seja, valem as mesmas considerações.

No presente trabalho as simulações numéricas foram realizadas em precisão dupla, tanto o código computacional que resolve as equações que modelam o escoamento compressível na tubeira (Mach2D, versão 6.4) quanto o código externo de otimização da função objetivo. Os efeitos dos erros de iteração, arredondamento e de programação são considerados desprezíveis, uma vez que o código Mach2D foi escrito com base em

protocolos para redução de tais erros. Desse modo, o erro numérico de discretização E_h representa a principal fonte de erro numérico a ser determinada.

A seguir, os estimadores de erros de discretização aplicados no presente trabalho são apresentados. Os processos de verificação de código e verificação de solução são discutidos nas seções subsequentes.

4.1 ESTIMADORES DE ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Durante a realização da verificação de código e verificação de solução, o erro de discretização deve ser calculado. Este é definido por Ferziger e Peric (2002) como a diferença entre a solução analítica exata (Φ) e sua solução numérica (ϕ), ou seja:

$$E(\phi) = \Phi - \phi, \tag{4.4}$$

onde E é erro de discretização.

Em termos práticos a solução analítica é quase sempre desconhecida, nesse caso é necessário estimá-la. Assim ao invés do erro numérico tem-se o erro estimado (U) (MARCHI, 2001; CHAPRA; CANALE, 2008):

$$U(\phi) = \phi_{\infty} - \phi, \tag{4.5}$$

onde ϕ_{∞} é uma estimativa para a solução analítica.

Existem muitos métodos para estimativa do erro de discretização disponíveis na literatura. De forma geral, esses métodos podem ser classificados como métodos a priori e a posteriori. Métodos a priori são aqueles em que um limite para o erro de discretização pode ser estabelecido antes que a solução numérica seja calculada (ROY, 2005). A outra categoria, a posteriori, fornece a estimativa de erro depois que a solução numérica é computada. Para obter a estimativa do erro de discretização, utiliza-se o procedimento a posteriori baseada em extrapolação. A abordagem mais popular é o estimador baseado na Extrapolação de Richardson (ER). A ER pode ser definida como a técnica cujo objetivo inicial buscava combinar aproximações de modo a se aumentar a acurácia de uma solução numérica considerando-se exclusivamente razão de refino igual a 2. Tal procedimento foi denominado Extrapolação de Richardson Padrão (ROACHE, 1998).

Posteriormente a ER para qualquer razão de refino foi determinada obtendo-se a denominada Extrapolação de Richardson Generalizada (OBERKAMPF; ROY, 2010). A expressão para a Extrapolação de Richardson Generalizada é obtida a seguir. Dada uma solução numérica ϕ obtida a partir de uma malha de tamanho h, a estimativa para o erro de discretização é dada por (OBERKAMPF; ROY, 2010):

$$U_{Ri}(\phi) = \phi_{\infty} - \phi, \tag{4.6}$$

onde $U_{Ri}(\phi)$ é a estimativa do erro da solução ϕ . A estimativa para o erro da solução numérica na malha h, pode ser escrita em termos da série de Taylor:

$$U_{Ri}(\phi) = \phi_{\infty} - \phi = C_1 h^{P_L} + C_2 h^{P_2} + C_3 h^{P_3} + \dots + C_n h^{P_n}, \tag{4.7}$$

A expressão 4.7 pode ser aplicada em duas malhas diferentes h_1 e h_2 . Considerando apenas o primeiro expoente, a aplicação da Eq. 4.7, resulta para as soluções ϕ_1 e ϕ_2 :

$$U_{Ri}(\phi_1) = C_1 h_1^{P_L},$$

$$U_{Ri}(\phi_2) = C_1 h_2^{P_L}.$$
(4.8)

Aplicando a Eq. 4.6 nas expressões 4.8 tem-se que:

$$\phi_{\infty} - \phi_1 = C_1 h_1^{P_L}, \phi_{\infty} - \phi_2 = C_1 h_2^{P_L}.$$
(4.9)

As expressões 4.9 formam um sistema de duas equações e duas incógnitas, C_1 e ϕ_{∞} . Nessas expressões são conhecidas as soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 e os valores de h_1 e h_2 . Presume-se também que é conhecida a ordem assintótica do erro P_L do erro de discretização. Isolando-se ϕ_{∞} a partir das expressões 4.9 chega-se à equação da extrapolação de Richardson:

$$\phi_{\infty} = \phi_1 + \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{(q^{P_L} - 1)},\tag{4.10}$$

onde ϕ_{∞} é a estimativa para a solução exata, P_L é a ordem assintótica do erro de discretização; e q é a razão de refino da malha, definida por:

$$q = \frac{h_1}{h_2},\tag{4.11}$$

onde h_1 é a solução da malha mais grossa e h_2 é a solução da malha mais fina.

Utilizando a Eq. 4.6, o estimador de Richardson (U_{Ri}) pode ser escrito como:

$$U_{Ri}(\phi_2) = \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{(q^{P_L} - 1)}. (4.12)$$

Conforme Roy (2010) uma das principais vantagens da ER sobre outros métodos consiste em que a ER é o procedimento de pós-processamento possível de ser aplicado a qualquer esquema (diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos, etc.). Por ser simples, o procedimento possui também baixo custo computacional, em termos de uso de CPU e tempo de processamento. Finalmente, ER pode ser utilizada para qualquer variável de interesse, local ou de campo. Existem, entretanto, algumas desvantagens no uso

de estimadores baseados na ER. A principal desvantagem consiste na necessidade de se fornecer soluções em diferentes malhas, sendo que estas soluções devem estar convergindo para a solução analítica. Isso pode ser custoso computacionalmente dependendo do tipo de problema que se deseja resolver, consistindo em uma dificuldade em muitas aplicações.

Outros estimadores baseados na Extrapolação de Richardson são definidos a seguir. O estimador de incerteza¹ de Roache, o GCI, é escrito conforme Eq. 4.13. Este estimador de incerteza pode ser descrito como o módulo do estimador de Richardson porém multiplicado pelo fator de segurança F_S , obtido empiricamente.

$$U_{GCI}(\phi_2) = F_S \frac{|\phi_2 - \phi_1|}{(q^{p_L} - 1)}. (4.13)$$

onde o fator F_S assume o valor 3 se forem usadas duas malhas ou 1,25 se forem usadas três ou mais malhas (ASME, 2009). O estimador GCI fornece 95% de probabilidade que a solução exata esteja na região dada pela incerteza. A correta representação da solução numérica (ϕ) e sua incerteza (U_{GCI}) obtida com o estimador GCI é (MARCHI, 2001):

$$\phi = \phi_2 \pm U_{GCI}(\phi_2) \tag{4.14}$$

O estimador convergente, apresentado por Marchi (2001) é escrito conforme a Eq. 4.15. Esse estimador é baseado no fato de que dentro do intervalo convergente de uma solução numérica, as extrapolações de Richardson calculadas com a ordem aparente (P_U) e a ordem assintótica (P_L) envolvem a solução analítica exata. Por consequência, o erro de discretização fica limitado pelas incertezas calculadas com o estimador de Richardson baseado nessas duas ordens (MARCHI, 2001). Assim, a solução, denominada convergente está na metade do intervalo entre as soluções $\phi_{\infty}(P_L)$ e $\phi_{\infty}(P_U)$. Para obter o valor da solução numérica convergente, ϕ_C utiliza-se a extrapolação de Richardson, Eq. 4.10 para obter duas soluções extrapoladas, uma usando a ordem assintótica e outra usando a ordem aparente:

$$\phi_C = \frac{\phi_\infty(P_L) + \phi_\infty(P_U)}{2} \tag{4.15}$$

onde $\phi_{\infty}(P_L)$ e $\phi_{\infty}(P_U)$ são soluções obtidas com a extrapolação de Richardson, P_L e P_U são as ordens assintóticas e aparente respectivamente. A ordem assintótica do erro de truncamento, P_L é definida como o menor expoente de h da equação geral do erro de discretização, Eq. 4.3. A ordem aparente do erro, P_U , é definida como a inclinação local da

De acordo com a ASME (2009), estimativa de erro e estimativa de incerteza são conceitos distintos. Um estimador de erro tem por objetivo fornecer uma melhora no resultado do cálculo. Por exemplo se "f" é uma grandeza qualquer calculada em determinada malha e o erro estimado é " ϵ ", então o valor melhorado é "f- ϵ ". De outra forma, um estimador de incerteza " $U_{x\%}$ " destina-se a fornecer um intervalo " $f \pm U_{x\%}$ " que caracteriza a extensão dentro da qual o valor de "f" provavelmente esteja, com probabilidade de x%.

curva de incerteza U da solução numérica ϕ versus o tamanho h dos elementos da malha em um gráfico logarítmico. Matematicamente, tem-se:

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_3 - \phi_2}\right)}{\log(q)},\tag{4.16}$$

onde ϕ_3 é a solução na malha fina, ϕ_2 é a solução em uma malha intermediária e ϕ_1 é a solução na malha grossa.

A incerteza (U_C) é a "banda" que envolve a solução analítica, com módulo da metade do intervalo entre $\phi_{\infty}(P_L)$ e $\phi_{\infty}(P_U)$, portanto:

$$U_C = \frac{|\phi_{\infty}(P_L) + \phi_{\infty}(P_U)|}{2} \tag{4.17}$$

Então, esta "banda" contém a solução exata. A apresentação apropriada da solução numérica fica:

$$\phi = \phi_C \pm U_C \tag{4.18}$$

Outros estimadores de erro de discretização apresentados por Marchi (2001) são os estimadores multicoeficientes. Tais estimadores são denominados bi, tri e multicoeficiente e utilizam a mesma concepção usada na obtenção da Extrapolação de Richardson. No caso da ER, apenas um único coeficiente C_1 é utilizado na obtenção da solução estimada ϕ_{∞} conforme a Eq. 4.8. No caso do estimador bicoeficiente são utilizados dois coeficientes (C_1 e C_2) na obtenção da solução estimada ϕ_{∞} . Este procedimento pode ser generalizado para considerar o número desejado de coeficientes.

Para o estimador multicoeficiente, a estimativa do erro é dada por:

$$U_{mc} = \phi_{\infty} - \phi \tag{4.19}$$

onde U_{mc} é a incerteza dada pelo estimador multicoeficiente, ϕ_{∞} é a estimativa da solução exata obtida com determinada malha h. Para a estimar a solução exata considera-se m equações:

$$\phi_{\infty} - \phi_{1} = C_{1}h_{1}^{P_{L}} + C_{2}h_{1}^{P_{2}} + \dots + C_{m-1}h_{1}^{P_{m-1}},
\phi_{\infty} - \phi_{2} = C_{1}h_{2}^{P_{L}} + C_{2}h_{2}^{P_{2}} + \dots + C_{m-1}h_{2}^{P_{m-1}},
\vdots = \vdots
\phi_{\infty} - \phi_{m} = C_{1}h_{m}^{P_{L}} + C_{2}h_{m}^{P_{2}} + \dots + C_{m-1}h_{m}^{P_{m-1}}.$$

$$(4.20)$$

onde ϕ e os coeficientes C_1, C_2, \dots, C_{m-1} são as incógnitas do sistema de equações 4.20. Obtida a solução, a estimativa do erro U_{mc} , pode ser calculada conforme a Eq. 4.19.

É possível ainda obter a estimativa de erro de discretização com base na Multiextrapolação de Richardson (MER), apresentado a seguir.

4.1.1 MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

Pode-se aplicar a ER recursivamente, obtendo-se a solução multiextrapolada, e com isso aumentar acurácia da solução numérica (MARTINS, 2013). Uma solução multiextrapolada é obtida através de diversas soluções ϕ_g em um total de G malhas, onde g é o número da malha e números maiores de g indicam malhas cada vez mais refinadas. A expressão para MER é dada por:

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{q^{p_{m-1}} - 1}$$
(4.21)

onde $\phi_{g,m}$ é a solução multiextrapolada, g é o índice da malha, m é o nível de extrapolação e g é a razão de refino.

A ordem de acurácia com MER aumenta em uma ordem verdadeira a cada nível de extrapolação (ZHANG; ZHANG, 2016; MARCHI et al., 2013):

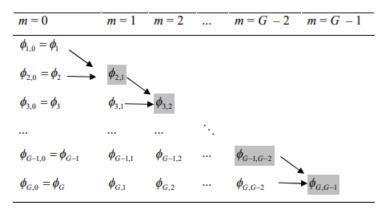
$$p_m = p_L + m(p_1 - p_L), (4.22)$$

onde p_L é a ordem assintótica do erro e m é o nível de extrapolação. A Eq. 4.22 é válida para g = [1,G] e m = [g-1], portanto o número máximo de níveis de extrapolações possíveis é sempre o número de malhas disponíveis menos uma unidade.

Assim, por exemplo, se as ordens verdadeiras para determinado esquema numérico são 1, 2, 3, 4..., e supondo que 3 malhas estejam disponíveis, então pode-se constatar que p_L vale 1 e que é possível realizar dois níveis de extrapolação. Aplicando a Eq. 4.22, sabe-se que a ordem esperada da solução multiextrapolada é 3.

A Fig. 14 mostra de forma esquemática a técnica de MER.

Figura 14 – Representação esquemática do emprego de MER



Fonte – Martins (2013).

O estimador baseado em MER utilizado no presente trabalho foi proposto por Martins (2013). Este estimador é dado por:

$$U_{\psi^*}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi^* - 1},\tag{4.23}$$

onde ψ^* é a taxa de convergência média dada pela seguinte expressão:

$$\psi^* = \begin{cases} \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\phi_{g+1,m+1} - \phi_{g,m}} & g = 2,3,...,G-1, \\ \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{(\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1})(\phi_{g-2,m-2} - \phi_{g-3,m-3})}, & g = G. \end{cases}$$
(4.24)

A ordem aparente para Multiextrapolação de Richardson (MARTINS, 2013) é dada por:

$$(p_U)_g = \frac{\log\left(\frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}\right)}{\log(q)}.$$
(4.25)

Os estimadores utilizados no presente trabalho foram calculados com o aplicativo Richardson 4.1, desenvolvido pelo Grupo de Pesquisa em Dinâmica dos Fluidos Computacional da Universidade Federal do Paraná. Este programa aplica os estimadores de erro de Richardson multiextrapolado, dado pela Eq. 4.23, estimador GCI, dado pela Eq. 4.13, estimador multicoeficiente, dado pela Eq. 4.19 e o estimador convergente, dado pela Eq. 4.17. Em resumo:

Tabela 4 – Estimadores de erro de discretização utilizados, obtidos com o aplicativo Richardson 4.1

Estimador:	Símbolo
Estimador GCI	U_{GCI}
Estimador Multicoeficiente	U_{mc}
Estimador de Richardson, baseado em MER	U_m
Estimador Convergente	U_C

Fonte – A autora (2021).

4.2 OTIMIZAÇÃO COM MER

Estudos mostram que a utilização de MER no processo de otimização pode reduzir o tempo computacional e aumentar a acurácia da solução (OLIVEIRA Jr., 2018). A seguir é

apresentado um algoritmo que mostra resumidamente como o procedimento de otimização com MER é realizado:

- 1. São lidas as ordenadas r_i de acordo com abscissas z_i predefinidas;
- O código computacional Mach2D recebe estas ordenadas e define-se uma nova geometria por interpolação conforme discutido na Seção 3.5.2;
- 3. Resolve-se o escoamento e calcula-se C_{fv} para esta geometria específica;
- 4. Repete-se o cálculo de C_{fv} para mais duas malhas, com razão de refino préestabelecida, totalizando três malhas;
- 5. Aplica-se o MER (Multiextrapolação de Richardson) e obtém-se o valor de C_{fv} extrapolado;
- 6. Verifica-se se a tolerância foi atingida. Se foi, o processo é interrompido, caso contrário, o código retorna a propor novas ordenadas r_i e retorna-se ao passo 2.;

As novas ordenadas r_i , propostas a cada iteração (item 5 do algoritmo) são obtidas através do método de otimização contido em bibliotecas da linguagem Python. Portanto, o algoritmo principal é escrito em Python, o qual "chama" a solução do escoamento inúmeras vezes durante o processo de otimização.

A Fig. 15 mostra o fluxograma com o processo de otimização com MER. A diferença desse procedimento com aquele apresentado na Fig. 13 é a obtenção de C_{fv} em mais duas malhas (mais grossas) e também o cálculo C_{fv} extrapolado com a Eq. 4.21. Espera-se que a aplicação de MER auxilie na redução do custo computacional uma vez que para obter a ordem de acurácia obtida com MER, seria necessário simular o escoamento em malhas mais finas, entretanto, MER possui baixo custo computacional pois se trata de pós processamento. Espera-se também um aumento na acurácia dos resultados extrapolados pela redução do erro de discretização. Essa abordagem foi utilizada por Oliveira Jr. (2018) com sucesso para o problema de minimização de arrasto aerodinâmico de nariz de foguete.

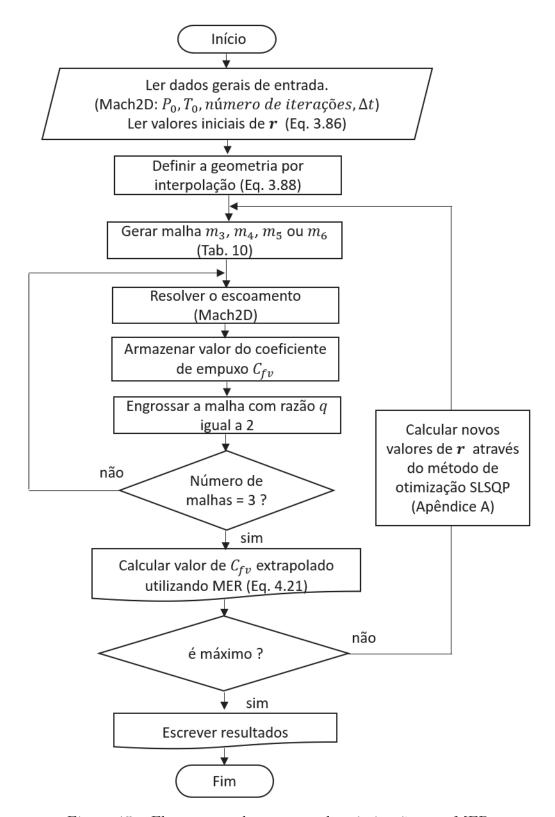


Figura 15 – Fluxograma do processo de otimização com MER.

4.3 VERIFICAÇÃO DE CÓDIGO

A verificação de código trata de avaliar se o programa (ou código) está sem erros de programação (OBERKAMPF; ROY, 2010) e se o algoritmo para obter a solução está

adequado. A verificação é composta de duas partes: verificação de código e verificação de solução. De acordo com a ASME (2009), a verificação de código pode ser feita unicamente por testes de convergência envolvendo discretização sistemática, devendo-se monitorar a solução obtida para uma solução benchmark. Claramente, o melhor benchmark que se pode ter é a solução analítica exata. Entretanto a maioria dos problemas de interesse em engenharia não possuem solução analítica conhecida. Nesse caso pode-se fazer uso da técnica de soluções fabricadas ou ainda comparação com resultados de outros códigos computacionais que foram anteriormente verificados (verificação código a código). Neste último caso, deve-se tomar vários cuidados envolvendo as aproximações numéricas, tolerâncias, entre outros.

Com objetivo de realizar a verificação de código, os resultados numéricos do coeficiente de descarga de tubeira com perfil "suave" são comparados à solução analítica do coeficiente de descarga C_d de Kliegel e Levine (1969). Esta solução foi obtida para escoamento bidimensional, irrotacional e gás perfeito. De acordo com os autores, a solução possui boa concordância com dados experimentais em tubeiras com raios de curvatura da garganta menores que 1. A solução é dada conforme a Eq. 4.26:

$$C_d = 1 - \frac{\gamma + 1}{\left(1 + \frac{r_{cgd}}{r_g}\right)^2} \left[\frac{1}{96} - \frac{8\gamma - 27}{2304\left(1 + \frac{r_{cgd}}{r_g}\right)} + \frac{754\gamma^2 - 757\gamma + 3633}{276480\left(1 + \frac{r_{cgd}}{r_g}\right)^2} \right]$$
(4.26)

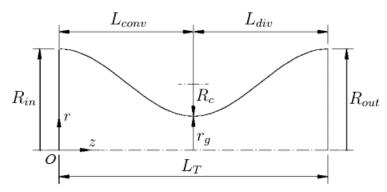
onde r_g é o raio da garganta, γ é a razão entre calores específicos e r_{cgd} é raio de curvatura na seção divergente da garganta.

O perfil de tubeira empregado nas simulações computacionais é dado matematicamente por (ARAKI; MARCHI, 2008):

$$r(z) = r_g + \frac{(R_{in} - r_g)}{2} \left\{ 1 + \cos\left[2\pi \left(\frac{z}{L_T}\right)\right] \right\}. \tag{4.27}$$

onde R_{in} é o raio de entrada da tubeira, r_g é o raio da garganta, L_T é o comprimento total da tubeira, z é a variável independente e r é a variável dependente. A figura esquemática da geometria pode ser vista a seguir na Figura 16:

Figura 16 – Perfil da tubeira parabólica utilizada na verificação do código Mach2D.



Fonte - Adaptada de Araki e Marchi (2008).

A solução foi obtida para escoamento invíscido e regime permanente, conforme discutido no Capítulo 3. Os parâmetros físicos e geométricos utilizados nas simulações são mostrados na Tabela 5 a seguir:

Tabela 5 – Parâmetros físicos e geométricos utilizados na verificação do código Mach2D.

Parâmetros	Raio de garganta, r_q [m]	0,05
	Raio da tubeira na entrada, R_{in} [m]	0,1
	Raio da tubeira na saída, R_{out} [m]	0,1
Geométricos	Comprimento da seção convergente, L_{conv} [m]	0,5
	Comprimento da seção divergente, L_{div} [m]	0,5
	Temperatura de estagnação [K]	3000
Parâmetros	Pressão de estagnação [Pa]	2E6
físicos físicos	Razão entre calores específicos	1,1713
	Constante do gás [J/kg.K]	$561,\!51$
	Calor específico à pressão constante $[J/kg.K]$	$3155,\!15$

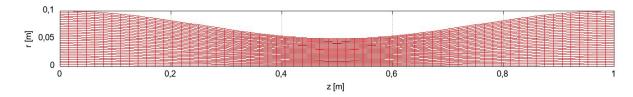
Fonte – Radtke (2014).

Para simular o escoamento o domínio foi discretizado utilizando-se malhas até 1024 volumes na direção axial e 512 na direção radial e razão de refino igual a dois, conforme mostra a Tabela 6 e Figura 17.

Malha	nz	nr	h	volumes
1	4	2	0,25	8
2	8	4	$0,\!125$	32
3	16	8	0,0625	128
4	32	16	0,03125	512
5	64	32	0,015625	2048
6	128	64	0,0078125	8192
7	256	128	0,00390625	32768
8	512	256	0,001953125	131072
9	1024	512	0,000976563	524288

Tabela 6 – Malhas utilizadas na verificação do código Mach2D

Figura 17 – Malha 64x32, uma das malhas utilizadas no processo de verificação de código.



A verificação da solução numérica e teste de acurácia foram realizados sobre a grandeza coeficiente de descarga C_d . Para essa variável foi calculada a ordem aparente Pu, que se aproxima da ordem assintótica, ou seja, que tem valor igual a um. As estimativas de erros foram calculadas utilizando o estimador de Richardson. Pode-notar que o valor do coeficiente de descarga aproxima-se do valor analítico (0,999948106217186) com o refino da malha.

Tabela 7 – Valores de C_d obtidos nas simulações para verificação de código.

Malha	t [s]	C_d	Pu	m [kg/s]	U_{Ri}
1	1,5	1,565288424		13,43399692	
2	2,5	1,330243989		11,41674172	
3	4,7	1,160658723	$0,\!470922692$	9,961286029	3,77
4	11,0	1,080612318	1,083102305	9,274292405	0.61
5	35,2	1,040624765	1,001285645	8,931101561	0,34
6	135,7	1,020425482	0,985246878	8,757742387	0,17
7	583,8	1,010232546	0,986734428	8,670262107	0,089
8	2091,3	1,005069175	0,98118452	8,625947776	0,045
9	16228,5	1,002502802	1,008582427	8,603922029	0,021

Fonte – A autora (2021).

Na Tab. 7, o valor da ordem aparente foi calculada com a Eq. 4.16, e o estimador de Richardson foi calculado com a Eq. 4.12, e t é o tempo gasto em cada simulação. O valor analítico do coeficiente de descarga C_d é 0,999948106217186.

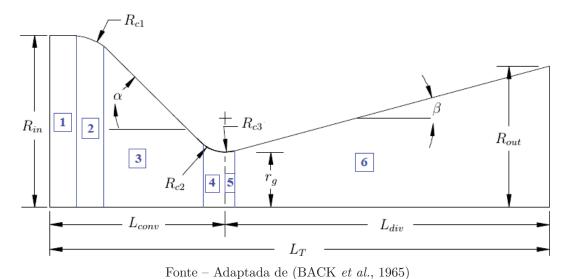
4.4 VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÃO

A verificação de solução tem como objetivo avaliar o erro de discretização, o qual está presente quando equações diferenciais parciais são resolvidas numericamente. Conforme explica Roy (2005), o erro de discretização ocorre devido ao truncamento da série de Taylor nas aproximações das derivadas utilizadas nas equações diferenciais parciais.

A verificação de solução deve ser realizada necessariamente após a verificação de código, caso contrário, os erros contidos no código afetariam o erro de discretização. Além disso, considera-se que os erros de arredondamento e de iteração são desprezíveis, sendo considerado apenas o erro de truncamento, portanto, chamado de erro de discretização.

A estimativa do erro numérico é feita a posteriori obtendo-se soluções em diferentes níveis de refinamento. No presente trabalho o código Mach2D foi utilizado nas simulações em seis malhas diferentes com refino q igual a 2. Foram utilizadas para o processo de verificação de solução três tubeiras distintas, a tubeira BMG45-15 do trabalho de Back et al. (1965), e as tubeiras Proto-36 e Proto-33 do trabalho de Germer (2014). A geometria dessas tubeiras pode ser vista na Fig. 18.

Figura 18 – Tubeiras utilizadas no processo de verificação de código.



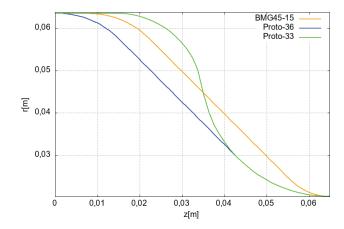


Figura 19 – Perfis das tubeiras BMG45-15, Proto-33 e Proto-36 utilizadas nas comparações.

Os parâmetros geométricos das tubeiras estão resumidos na Tab. 8 a seguir:

Tabela 8 – Parâmetros geométricos das tubeiras BMG45-15, Proto-36 e Proto-33, conforme Back et al. (1965) e Germer (2014).

Parâmetro	BMG45-15	Proto-36	Proto-33
r_g [m]	0,02032	0,02032	0,02032
\tilde{R}_{in} [m]	0,0635	0,0635	0,0635
R_{out} [m]	0,052324	0,052324	0,052324
L_{conv} [m]	0,0648716	0,0648716	0,0648716
L_{div} [m]	$0,\!1201674$	$0,\!1201674$	$0,\!1201674$
L_T [m]	0.185039	0.185039	0.185039
R_{c1} [m]	0,02032	0,02032	0,02032
R_{c2} [m]	0,0127	0,03048	0,03048
R_{c3} [m]	0,0127	0,0127	0,0127
α [°]	45	45	80
β [$^{\circ}$]	15	15	15
L_1 [m]	7,874E-03	6,336E-04	1,467E-02
L_2 [m]	1,438E-02	1,438E-02	2,019E-02
L_3 [m]	3,363E-02	2,831E-02	-
L_4 [m]	8,992 E-03	2,155E-02	3,002 E-02
L_5 [m]	3,277E-03	3,277E-03	3,277E-03
L_6 [m]	1,169E-01	1,169E-01	1,169E-01

Fonte – Germer (2014) e Back et al. (1965)

Na Tab. 8, r_g é o raio de garganta, R_{in} é o raio da tubeira na entrada, R_{out} é o raio da tubeira na saída, L_{conv} é o comprimento da seção convergente, L_{div} é o comprimento da seção divergente, L_T é o comprimento total, R_{c1} é o raio de curvatura na entrada, R_{c2} é o raio de curvatura na garganta na região do convergente, R_{c3} é o raio de curvatura na garganta na região do divergente, α é o semiângulo do convergente e β é o semiângulo do divergente. Os valores de L_1 , L_2 , etc, se referem aos comprimentos de cada seção conforme

indicado na numeração em azul na Fig. 18.

Os parâmetros físicos utilizados nas simulações do presente trabalho podem ser vistos na Tab. 9. O fluido considerado foi o ar. Os parâmetros para o ar (Tab. 9) utilizados nas simulações foram retirados de Incropera e DeWitt (1998) (Anexo A).

Tabela 9 – Parâmetros físicos utilizados nos testes.

Temperatura de estagnação $[K]$	833,333333
Pressão de estagnação $[Pa]$	$1,725068 \times 10^6$
Razão entre calores específicos	1,35
Constante do gás $[J/(kg.K)]$	287
Calor específico a pressão constante $[J/(kg.K)]$	1106,3326

Fonte – Incropera e DeWitt (1998).

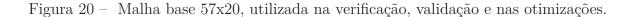
A malha base utilizada para a realização da verificação consiste na malha de 57x20 volumes, sendo as demais obtidas multiplicando por 2 tanto os volumes na direção z quanto em r. A Tabela 10 mostra como os volumes foram distribuídos na região do convergente e divergente. A mesma malha base será a utilizada na verificação, validação e otimização da tubeira BMG45-15. O valor nzc é o número de volumes na região do convergente, na direção axial; nzd é o número de volumes na região do divergente, na direção axial; nz é o número total de volumes nzc mais nzd; nr é a quantidade total de volumes na direção radial.

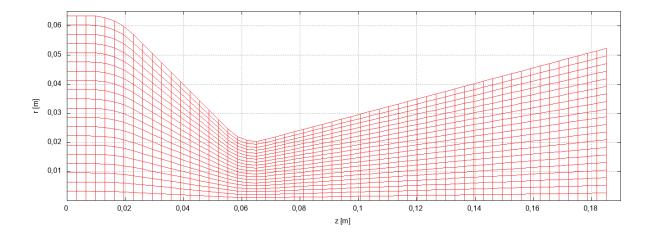
Tabela 10 – Malhas utilizadas nas otimizações

Malha	nzc	nzd	nz	nr	h(conv)	h(div)	Volumes
m1	20	37	57	20	0,00162179	0,001623884	1140
m2	40	74	114	40	0,000810895	0,000811942	4560
m3	80	148	228	80	0,000405448	0,000405971	18240
m4	160	296	456	160	0,000202724	0,000202985	72960
m5	320	592	912	320	0,000101362	0,000101493	291840
m6	640	1184	1824	640	5,06809E-05	5,07464E-05	1167360

Fonte – A autora (2021).

A malha base utilizada nas otimizações pode ser vista na Figura 20:





4.4.1 RESULTADOS

Após realizar simulações nas tubeiras BMG45-15, Proto-36 e Proto-33, obteve-se os valores do coeficiente de empuxo no vácuo, C_{fv} para cada malha, de m1 a m6. A seguir, na Tab. 13 é apresentada a ordem aparente Pu, calculada com a Eq. 4.16 para os resultados de C_{fv} obtidos com a tubeira BMG45-15. Pode-se verificar que a ordem aparente converge para o valor da ordem assintótica com o aumento do número de volumes. Os valores do coeficiente de empuxo no vácuo, C_{fv} são apresentados para as diversas malhas na Tab. 11 juntamente com as estimativas de erro de discretização dos estimadores U_{GCI} , U_{MC} e U_m . A estimativa de erro de discretização U_{GCI} mostrada na Tab 11 foi calculada através da Eq. 4.13. Este estimador utiliza fator de segurança F_s , e conforme explica Roache (1998), quando são utilizadas apenas duas malhas o valor de F_s é igual a 3, e para mais que três malhas, o fator vale 1,25. Nas tabelas, as posições contendo "—" referem-se a valores para os quais estimadores não se aplicam.

Como comentado anteriormente, todos os estimadores de erro de discretização foram obtidos com o aplicativo Richardson 4.1. A tabela 11 mostra ainda os estimadores multicoeficiente, U_{MC} e estimador baseado em MER, U_m , dados respectivamente pelas Eqs. 4.19 e 4.23. O valor de $C_{fv\infty}$ se refere a estimativa para a solução exata, dada pela Eq.4.10, mas com base em Pu.

A tubeira Proto-33 e Proto-36 são duas das tubeiras otimizadas por Germer (2014), por isso apresentam maiores valores de C_{fv} em relação à tubeira base BMG45-15, conforme mostram os valores de C_{fv} nas Tabs. 12 e 14. Os resultados com a tubeira Proto-33 são

mostradas a seguir. Pode-se notar, pela Tab. 13 que a ordem aparente do erro Pu tende para a ordem assintótica p_L como esperado.

Tabela 11 – Valores de C_{fv} da tubeira BMG45-15 e estimativas de erro de discretização.

Malha	C_{fv}	$U_{GCI}(Pu)$	U_{MC}	$C_{fv\infty}$	U_m
m1	1,627968	-	-	-	
m2	1,604733	6,97E-02	-2,32E-02	1,581499	2,67E-04
m3	1,593216	1,43E-02	-1,14E-02	1,581766	9,85E-05
m4	1,585756	1,71E-02	-9,25E-03	1,576505	7,78E-04
m5	$1,\!581667$	6,20E-03	-4,24E-03	1,577419	9,65E-04
m6	1,579697	2,46E-03	-1,81E-03	1,577888	-2,83E-04

Fonte – A autora (2021).

Na tabela 12 são mostrados os valores das estimativas de erro de discretização U_{GCI} , multicoeficiente, U_{MC} e baseado em MER, U_m . Pode-se notar que os valores das estimativas de erro de discretização para o estimador baseado em MER apresenta os menores valores, como esperado, fornecendo, portanto, solução com erro muito menor que a solução numérica sem extrapolação.

Tabela 12 – Valores de C_{fv} da tubeira Proto-33 e estimativas de erro de discretização.

Malha	C_{fv}	$U_{GCI}(Pu)$	U_{MC}	$C_{fv\infty}$	U_m
m1	1,647768	-	-	-	-
m2	1,625779	6,59E-02	-2,19E-02	1.603789	-6,73E-03
m3	1,612248	2,70E-02	-1,52E-02	1.597028	-2,08E-03
m4	1,604326	1,39E-02	-8,89E-03	1.595434	4,64E-04
m5	1,600212	$5,\!55E-03$	-4,12E-03	1.596089	1,78E-03
m6	1,598289	2,40E-03	-1,72E-03	1,596568	-2,71E-04

Fonte – A autora (2021).

Na Tab. 13 é apresentada a ordem aparente obtida das simulações com a tubeira Proto-36. Novamente, a ordem aparente tende a ordem assintótica. Pode ser visto na Tab. 14 que a solução extrapolada $C_{fv\infty}$ apresentou as menores estimativas para o erro de dicretização. A estimativa de erro através do U_{GCI} é uma "banda" de erro ampliada em relação ao estimador de Richarson, como mostrado através da Eq. 4.13 e apresentou as maiores estimativas de erro em todos os casos.

Malhas	$Pu \; (BMG45-15)$	Pu (Proto-36)	Pu (Proto-33)
m1	-	-	-
m2	-	-	-
m3	1,012501	0,626270	0,700644
m4	0,626585	0,793037	0,772241
m5	0,867050	0,961923	0,945239
m6	1,054310	1,091750	1,097252

Tabela 13 – Ordem aparente Pu para C_{fv} nas tubeiras BMG45-15, Proto-36 e Proto-33.

Tabela 14 – Valores de C_{fv} da tubeira Proto-36 e estimativas de erro de discretização.

Malha	C_{fv}	$U_{GCI}(C_{fv})$	$U_{MC}(C_{fv})$	$C_{fv\infty}$	$U_m(C_{fv\infty})$
m1	1,655345	-	-	-	-
m2	1,630712	7,38E-02	-2,46E-02	1,606079	-9,65E-03
m3	1,614753	3,66E-02	-1,83E-02	1,596367	-1,08E-03
m4	1,605543	1,57E-02	-1,01E-02	1,595390	4,17E-04
m5	1,600815	6,23E-03	-4,69E-03	1,596120	1,30E-03
m6	1,598596	2,77E-03	-2,01E-03	1,596588	-1,65E-04

4.4.2 RESUMO DO CAPÍTULO

A tabela 15 mostra de forma resumida os valores do coeficiente de empuxo no vácuo, C_{fv} , e o valor das estimativas de erro obtidas com o aplicativo Richardson 4.1. Essas tubeiras e os respectivos resultados serão utilizados para comparação com os resultados das otimizações.

Tabela 15 – Valores da grandeza de interesse C_{fv} e estimadores das tubeiras utilizadas para comparação

	Cfv	U_{GCI}	U_{mc}	U_m
BMG45-15	1,579697	$\pm 2,46$ E-03	-1,80E-03	-2,83E-04
Proto-36	1,598596	$\pm 2,77E-03$	-2,01E-03	-1,65E-04
Proto-33	1,598289	$\pm 2,40$ E-03	-1,72E-03	-2,71E-04

Fonte – A autora ($\overline{2021}$).

5 VALIDAÇÃO

A validação é a avaliação de quão bem um modelo matemático representa determinado fenômeno físico (ROACHE, 1998). A validação pode ser definida como a determinação do erro de modelagem, que ocorre devido a simplificações sobre o fenômeno físico na concepção dos modelos matemáticos. Portanto, o processo que quantifica esse tipo de erro é denominado de validação (ROACHE, 1998), sendo seu objetivo determinar em que medida um modelo matemático representa determinado fenômeno real.

A realização da validação requer dados confiáveis de experimentos. Em pesquisas com tubeiras, dados de variáveis ao longo do perfil são escassos. Por essa razão, o trabalho de Back et al. (1965) foi escolhido para comparação com os resultados numéricos.

No trabalho de Back et al. (1965) são apresentados dados da pressão estática na parede em tubeiras de diferentes razões de raios, diferentes formatos de convergente: cônico e circular de diferentes comprimentos. As medições são feitas em diferentes faixas de pressão e temperaturas de estagnação. Os autores avaliam o efeito das razões de raio (raio de curvatura na garganta pelo raio da garganta), da inclinação do convergente, da espessura da camada limite na entrada e efeitos da refrigeração na parede através da comparação com dados experimentais de pressão estática, medidos em regiões da tubeira. Os resultados do estudo mostram que o modelo unidimensional isentrópico traz discrepâncias de até 45% na região da garganta em relação aos valores experimentais tanto para tubeiras com razões de raios iguais a 0,625 quanto 2. O modelo bidimensional concordou com os dados experimentais para as tubeiras de razões de raio igual a 2, porém ficaram inadequadas para razões de raio igual a 0,625. Os autores também concluíram que as pressões medidas na região da garganta e divergente se mostraram independentes das configurações de entrada e também foram obtidos pequenos desvios na pressão estática para o modelo unidimensional em seções cônicas.

Medidas experimentais de pressão estática foram realizadas em 5 tubeiras. Três das tubeiras avaliadas possuem convergente formado por arcos de circunferência e as outras duas possuem o convergente com formato cônico. A pressão na saída da tubeira é a atmosférica e fluido de trabalho é o ar. A tubeira utilizada no presente trabalho foi a BMG45-15. Tal terminologia foi dada por Germer (2014) devido aos semiângulos de convergente e divergente de tal tubeira serem de $45^{\circ}(\alpha)$ e $15^{\circ}(\alpha)$ respectivamente. A tubeira BMG45-15 possui razão de raios igual a 0,625 (λ_R). Os detalhes são mostrados conforme Fig. 21.

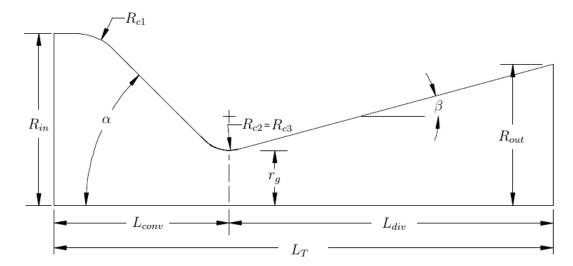


Figura 21 – Tubeira BMG45-15 do artigo de Back *et al.* (1965). Adaptado de Germer (2014).

Para realizar a validação, os resultados experimentais do teste 351, conforme mostrados por Back et~al.~(1965) foram retirados dos gráficos. Mais detalhes podem ser vistos no Anexo B. Com objetivo de avaliar a incerteza inerente à extração dos dados experimentais do gráfico, foram realizadas várias leituras utilizando o software WebPlotDigitizer-4.4. Na tabela 16 são mostrados os valores lidos (média dos valores) para a coordenada x e os valores das pressões com as respectivas incertezas. A incerteza é dada como o 2,53 vezes o desvio padrão médio, que corresponde a 99% de confiança em uma distribuição normal de probabilidade. As tabelas 52 e 53, no Apêndice F, mostram os valores lidos das coordenadas em x e o valor da pressão.

Pode-se observar, na Tab. 16, que a incerteza devido à leitura dos dados é pouco maior que 1% nos pontos 9, 10, 11 e 12, sendo que, devido à falta de nitidez, a leitura nesses pontos é duvidosa, como pode ser visto na Figura 77 no Anexo B. Na leitura dos dados tentou-se espalhar os pontos, aumentando com isso a incerteza. Pode-se observar que a incerteza é de aproximadamente 2% nos pontos 18 e 19, ficando em aproximadamente 4% no ponto 20. De acordo com Back et al. (1965), a estimativa da incerteza experimental foi de 5% na região da entrada da tubeira, sendo considerado no presente trabalho que a entrada corresponde ao ponto 1 ao ponto 7. Nos demais pontos a incerteza experimental relatada pelo autor foi de 1%.

Tabela 16 –	Pressões para	cada coordena	da com as resp	pectivas incer	tezas relacio	onadas à
	extração de da	dos experiment	tais do gráfico	do artigo de	Back et al.	(1965).

Ponto	coordenada x [m]	Incerteza [%]	Pressão [Pa]	Incerteza [%]
1	0.020479 ± 0.000087	0,427	1724016 ± 1159	0,067
2	$0,025899 \pm 0,000075$	0,291	1724167 ± 1588	0,092
3	0.030209 ± 0.000087	0,289	1719983 ± 1513	0,088
4	0.035435 ± 0.000046	0,130	1718040 ± 682	0,040
5	$0,044544 \pm 0,000048$	0,108	1707990 ± 718	0,042
6	$0,049058 \pm 0,000045$	0,091	1681782 ± 919	0,055
7	$0,053089 \pm 0,000018$	0,034	1638483 ± 1285	0,078
8	$0,056314 \pm 0,000327$	0,581	1480674 ± 7948	0,537
9	$0,062334 \pm 0,000487$	0,781	918563 ± 9733	1,060
10	$0,062661 \pm 0,000664$	1,060	842709 ± 11207	1,330
11	$0,066196 \pm 0,000197$	$0,\!298$	411681 ± 4527	1,100
12	$0,066781 \pm 0,000267$	0,400	372547 ± 4000	1,074
13	$0,071470 \pm 0,000035$	0,049	338329 ± 1065	0,315
14	$0,079061 \pm 0,000050$	0,063	318903 ± 748	0,235
15	$0,092048 \pm 0,000051$	0,055	220356 ± 980	0,445
16	$0,100675 \pm 0,000044$	0,044	166685 ± 1286	0,771
17	$0,117156 \pm 0,000053$	0,045	102747 ± 1800	1,752
18	$0,134265 \pm 0,000047$	0,035	64427 ± 1307	2,028
19	$0,152124 \pm 0,000109$	0,072	39235 ± 1173	2,991
20	$0,169259 \pm 0,000094$	0,055	27711 ± 1127	4,068

Adicionando as incertezas da leitura dos dados do gráfico às incertezas experimentais dos testes, resultam as incertezas combinadas (u) de posição e de pressão (ASME, 2009):

$$u = \sqrt{(u_{experimento})^2 + (u_{gráfico})^2}$$
 (5.1)

onde $u_{experimento}$ para x é dado por Back et al. (1965) como 0.002".

Os resultados finais das incertezas combinadas para a coordenada x e a pressão $(P_{wall}exp.)$ podem ser vistos na Tab. 17. Também na Tab. 17 são mostrados os valores numéricos da pressão na parede $(P_{wall}num.)$ e do estimador GCI. Os resultados numéricos apresentado na tabela 17 foram obtidos na malha m6 com os dados apresentados na Seção 4.4, conforme Tab. 9.

Tabela 17 — Resultados experimentais e numéricos da pressão na parede com estimador U_{GCI}

Ponto	coordenada x [m]	P_{wall} exp. [Pa]	P_{wall} num. [Pa]
1	0.020479 ± 0.000101	1724016 ± 86209	1723584 ± 10
2	0.025899 ± 0.000091	1724167 ± 86223	1721373 ± 55
3	$0,030209 \pm 0,000101$	1719983 ± 86012	1718869 ± 23
4	0.035435 ± 0.000068	1718040 ± 85905	1714077 ± 43
5	$0,044544 \pm 0,000070$	1707990 ± 85402	1693743 ± 102
6	$0,049058 \pm 0,000068$	1681782 ± 84094	1666997 ± 125
7	$0,053089 \pm 0,000054$	1638483 ± 81934	1609330 ± 189
8	$0,056314 \pm 0,000331$	1480674 ± 16805	1427998 ± 5572
9	$0,062334 \pm 0,000490$	918563 ± 13383	841909 ± 687
10	$0,062661 \pm 0,000666$	842709 ± 14021	809416 ± 956
11	$0,066196 \pm 0,000204$	411681 ± 6118	399076 ± 1222
12	$0,066781 \pm 0,000272$	372547 ± 5466	355418 ± 1512
13	$0,071470 \pm 0,000062$	338329 ± 3547	335614 ± 3824
14	$0,079061 \pm 0,000071$	318903 ± 3275	305828 ± 1713
15	$0,092048 \pm 0,000072$	220356 ± 2412	217256 ± 865
16	$0,100675 \pm 0,000067$	166685 ± 2105	167734 ± 863
17	$0,117156 \pm 0,000073$	102747 ± 2073	103647 ± 855
18	$0,134265 \pm 0,000069$	64427 ± 1457	66063 ± 756
19	$0,152124 \pm 0,000121$	39235 ± 1237	43775 ± 631
20	$0,169259 \pm 0,000107$	27711 ± 1161	31000 ± 501

As Figs. 22 e 23 mostram a distribuição de pressões dos pontos 1 a 10 e 11 a 20 respectivamente. É possível verificar boa concordância do modelo invíscido com o experimento.

A Tab. 18 mostra a comparação dos valores experimentais de pressão obtidos por Back et al. (1965) com os valores de pressão obtidos com a sexta malha, m6, solução com MER, P_m , e solução convergente, P_C . Nesse caso os valores de pressão experimentais da Tab. 17 foram repetidos aqui. Para facilitar a leitura, os valores da incerteza não foram incluídos. A Tab. 18 mostra ainda os erros relativos das soluções obtidas na sexta malha, das soluções obtidas com MER e com a solução convergente.

Pode-se perceber que as soluções extrapoladas com MER (P_m) possuem menor erro relativo em relação ao resultado experimental na maioria dos pontos. Apenas no ponto 13 por exemplo, a solução na malha m6 apresentou erro relativo bem inferior aos demais. Os valores das pressões obtidas com a solução convergente (P_C) também possuem menor erro relativo na maioria dos pontos e se aproximam dos resultados da solução com MER.

Capítulo 5. Validação

Figura 22 – Pressões experimentais e numéricas da tubeira BMG45-15 dos pontos 1 a 10.

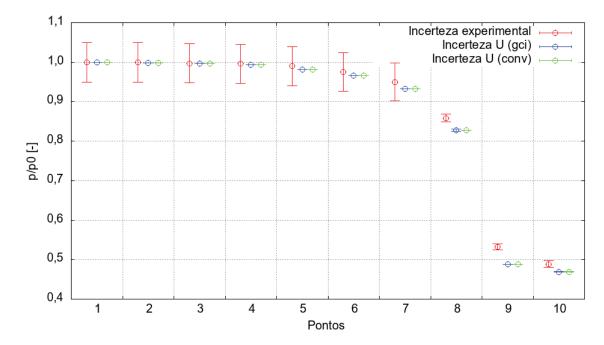


Figura 23 — Pressões experimentais e numéricas da tubeira BMG45-15 dos pontos 11 a $\,$ 20.

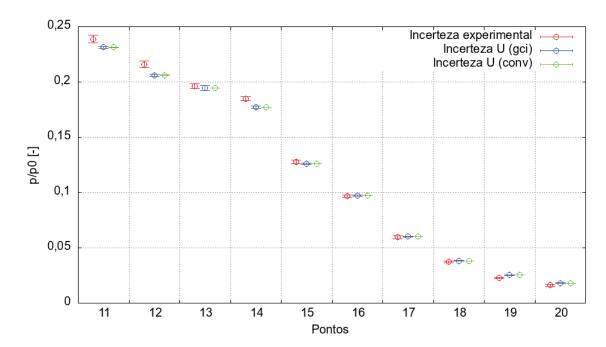


Tabela 18 – Comparação da pressão estática obtida experimentalmente (Exp.) conforme Back et al. (1965), da pressão obtida na malha m6 (m6), obtida por MER (P_m) e pelo estimador convergente (P_C) .

Ponto	Exp. [Pa]	<i>m</i> 6 [Pa]	Erro (m6) [%]	P_m [Pa]	Erro (P_m) [%]	P_C [Pa]	Erro (P_C) [%]
1	1724016	1723584	0,025085	1723591	0,024655	1723591	0,024661
2	1724167	1721373	0,162054	1721278	0,167557	1721307	0,16591
3	1719983	1718869	0,064776	1718887	0,063748	1718887	0,063735
4	1718040	1714077	$0,\!230637$	1714111	$0,\!22867$	1714111	$0,\!228658$
5	1707990	1693743	0,834116	1693824	$0,\!829389$	1693824	0,829408
6	1681782	1666997	0,879124	1667095	0,873284	1667094	0,873324
7	1638483	1609330	1,779303	1609230	1,785409	1609210	1,786591
8	1480674	1427998	$3,\!557564$	1424536	3,791418	1424435	3,798238
9	918563	841909	8,344957	842339	8,29819	842350	8,296972
10	842709	809416	3,950798	810031	3,87771	810039	3,876782
11	411681	399076	3,061899	398311	3,24762	398292	3,252418
12	372547	355418	4,597888	350749	$5,\!851226$	354705	4,789314
13	338329	335614	$0,\!802605$	332637	1,682435	332669	1,672991
14	318903	305828	4,100095	304459	$4,\!529437$	304459	4,529271
15	220356	217256	$1,\!406902$	216612	1,698999	216624	1,693727
16	166685	167734	-0,6296	167086	-0,24076	167097	-0,24752
17	102747	103647	-0,87613	102978	-0,22487	102984	-0,23066
18	64427	66063	-2,53952	65468	-1,61552	65466	-1,61173
19	39235	43775	-11,5702	43294	-10,3433	43287	-10,3269
20	27711	31000	-11,8695	30621	-10,5015	30615	-10,4801

A figura 24 mostra os resultados experimentais da pressão na parede e as soluções analítica unidimensional e numérica. Pode-se concluir que as soluções numéricas obtidas pelo código Mach2D para a pressão na parede, para escoamento invíscido, monoespécie, possui bom ajuste com os dados experimentais de Back et al. (1965).

Ainda, para avaliar a concordância dos resultados numéricos com os experimentais de outras grandezas, o coeficiente de descarga dado também por (BACK et al., 1965) foi utilizado para validação. A solução numérica do coeficiente de descarga (C_d) pode ser visto na Tab. 19. Os valores das soluções com MER $(C_{d\infty})$ e da solução convergente $(C_d)_C$ também são mostradas. A ordem aparente converge para a assintótica conforme mostra a Tab. 20. A Tab. 21 mostra as estimativas de erro de discretização das soluções numéricas com o coeficiente de descarga. Deve-se mencionar que o estimador U_m se refere ao valor extrapolado $C_{d\infty}$ mostrado na Tab. 19 e o estimador U_C se refere à solução convergente T_C . Os estimadores U_{GCI} e U_{MC} são relativos à solução C_d .

1,8 Solução analítica 1D Solução numérica 1,6 Resultado experimental 1,4 1,2 Pressão [MPa] 1 0,8 0,6 0,4 0,2 0 0,02 0,04 0,06 0,08 0,1 0,12 0,14 0,16 0,18 z[m]

Figura 24 – Soluções analítica, numérica e resultado experimental.

Tabela 19 – Soluções numéricas para o coeficiente de descarga.

h	C_d	$C_{d\infty}$	$(C_d)_C$
m1	1,056688	-	-
m2	1,022767	0,988847	-
m3	1,004318	0,984877	0,984094
m4	0,993371	0,980761	0,979909
m5	0,987447	0,981246	0,980992
m6	0,984477	0,981575	0,981500

Fonte – A autora (2021).

Tabela 20 – Ordem aparente Pu para a solução do coeficiente de descarga C_d .

Malha	P_u
m1	-
m2	-
m3	0,878619
m4	0,752966
m5	0,885981
m6	0,996243

Fonte – A autora (2021).

Tabela 21 –	Estimadores	de erro	de	discretização	relativos	às	soluções	numéricas	do
	coeficiente de	descarg	a.						

	U_{GCI}	U_{mc}	U_m	U_C
m1	-	-	-	-
m2	1,02E-01	-3,39E-02	-3,95E-03	-
m3	2,75E-02	-1,94E-02	-	1,78E-03
m4	2,00E-02	-1,26E-02	4,34E-04	2,51E-03
m5	8,73E-03	-6,20E-03	1,02E-03	$5,\!31\text{E-}04$
m6	3,73E-03	-2,90E-03	-2,61E-04	7,76E-06

Na Tab. 22 são mostradas medidas experimentais do coeficiente de descarga dadas por Back et al. (1965). Nesse caso, a incerteza relacionada à extração dos dados da figura foi considerada como 2,53 vezes o desvio padrão, que corresponde a um intervalo de aproximadamente 99% de confiança. das leituras "L1", "L2". A incerteza experimental é considerada com este mesmo valor.

Tabela 22 – Medidas do coeficiente de descarga.

Pontos:	L1	L2	L3	L4
1	0,982441	0,978216	0,978296	0,979249
2	0,979938	0,975973	0.975965	0,977177
3	0,972178	0,972255	0,975969	0,973640

O valor médio das leituras realizadas conforme a Tab. 22 é mostrado na Tab. 23. Nesta tabela são mostrados o desvio padrão e a incerteza devido à extração de dados, U.

Tabela 23 – Valor médio e incerteza relativa à leitura de C_d .

média	0,976775
desvio padrão	3,106E-03
U	7,858E-03
	(2021)

Fonte – A autora (2021).

A figura 25 mostra o coeficiente de descarga experimental e numérico com as respectivas incertezas. Pode-se verificar que os valores se encontram dentro da faixa de incerteza, mostrando boa concordância entre o resultado numérico e experimental.

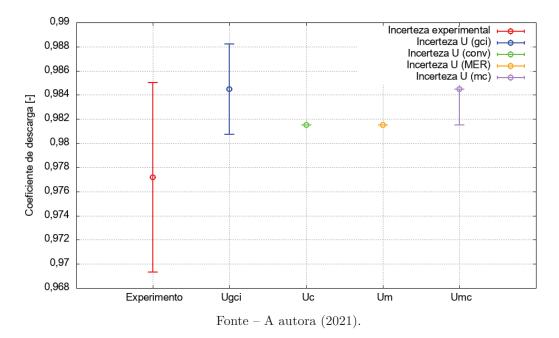


Figura 25 – Coeficiente de descarga para a tubeira a BMG45-15.

O coeficiente de empuxo também foi utilizado para validação. As soluções numéricas do coeficiente de empuxo C_{fv} e $C_{fv\infty}$ podem ser vistas na tabela 24. Os estimadores de erro de discretização são mostrados na 25. Pode se notar que a solução com MER novamente possibilita menores erros conforme mostra Tab. 25. A ordem aparente, mostrada na 26 mostra que a solução tende para a ordem assintótica.

Tabela 24 – Medidas do coeficiente de empuxo no vácuo C_{fv} e ordem aparente relativa à solução numérica do mesmo.

Malha	C_{fv}	$C_{fv\infty}$	Pu
m1	0,999359	-	-
m2	0,985096	0,970833	-
m3	0,978026	0,970997	1,012502
m4	0,973447	0,967768	0,626585
m5	0,970936	0,968328	0,867051
m6	0,969727	0,968616	1,054311

Fonte – A autora (2021).

Tabela 25 – Estimadores de erro de discretização relativos às soluções numéricas do coeficiente de empuxo.

Malha	U_{GCI}	U_{MC}	U_m
m1	-	-	-
m2	4,28E-02	-1,43E-02	1,64E-04
m3	8,84E-03	-7,03E-03	-
m4	1,05E-02	-5,68E-03	4,78E-04
m5	3,81E-03	-2,61E-03	5,92E-04
m6	1,51E-03	-1,11E-03	-1,74E-04

Tabela 26 – Ordem aparente relativa à solução numérica do coeficiente de empuxo C_{fv} .

Malha	Pu
m1	-
m2	-
m3	1,012502
m4	0,626585
m5	0,867051
m6	1,054311

Fonte – A autora (2021).

A figura 26 mostra o valor do coeficiente de empuxo no vácuo. O modelo invíscido é adequado para obter esse parâmetro pois a solução numérica e sua incerteza estão dentro da faixa de incerteza do resultado experimental. As leituras dos valores experimentais são mostradas na 27, onde os valores de A/Ag são as ordenadas para extração dos dados. A/Ag corresponde a área adimensionalizada pela área da garganta da tubeira. O erro experimental dado por (BACK $et\ al.,\ 1965$) é de 1%.

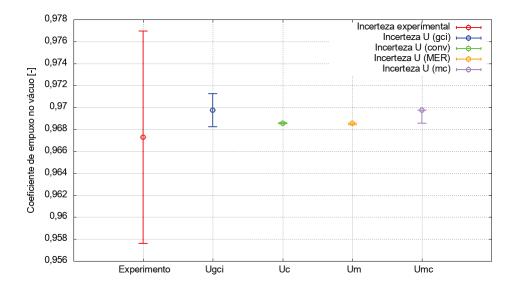


Figura 26 – Coeficiente de empuxo no vácuo para a tubeira BMG45-15.

Tabela 27 – Dados das leituras de coeficiente de empuxo. Fonte: Back et al. (1965).

Leituras				
A/Ag	C_{fv}			
4,335113821	0,967312382			
4,469323159 4,595123811	$0,967306731 \\ 0,967259329$			
4,54062187 4,398045051	0,967303729 0,967351838			
4,687372129	0,96721334			
média	0,967291225			
$\operatorname{erro}(1\%)$	0,009672912			
U 0,009672912 Fonte – A autora (2021).				

Os resultados apresentados neste capítulo permitem concluir que parâmetros como o coeficiente de descarga e coeficiente de empuxo no vácuo podem ser obtidos adequadamente pelo modelo invíscido. Ambos têm seus valores numéricos dentro da faixa de incerteza experimental. Os resultados numéricos para a pressão na parede concordaram satisfatoriamente com os valores experimentais disponíveis no trabalho de Back et al. (1964). Os maiores desvios com relação aos dados experimentais foram observados nos dois últimos pontos. Isso está relacionado ao descolamento do escoamento, relatado por Back et al. (1965).

6 RESULTADOS DAS OTIMIZAÇÕES

Os capítulos anteriores mostraram toda a teoria que embasa o problema abordado na presente tese. Foi apresentada a metodologia, ou seja, a forma que o procedimento de otimização será realizado, bem como a teoria para aplicação do estimador MER na otimização. Neste capítulo, são apresentados os resultados das otimizações. Serão apresentados resultados das otimizações sem a técnica de MER e depois na seção 6.3.1 com MER. No fim do capítulo são apresentadas otimizações realizadas em toda a tubeira. As otimizações em toda tubeira são realizadas utilizando-se os resultados da otimização no convergente com o método Rao (RAO, 1958). Portanto, o presente capítulo está organizado da seguinte forma: otimização no convergente (sem e com MER) e finalmente otimização em toda tubeira com o método de Rao.

6.1 AMBIENTES COMPUTACIONAIS

Os equipamentos utilizados para as otimizações foram os *clusters* do Centro Nacional de Supercomputação (CESUP), sediado na Universidade Federal do Rio Grande do Sul e também o *cluster* do CENAPAD-UFC, Centro Nacional de Alto Desempenho da Universidade Federal do Ceará, ambos integrados ao sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho (SINAPAD).

O equipamento do CESUP contém 64 unidades de processamento, cada unidade disponibilizando 64 GB de RAM e 2 processadores dodecacore AMD Opteron (32 unidades com o modelo 6176 SE, de 2.3 GHz e 32 outras com o modelo 6238, de 2.9 GHz de frequência). Um sistema gerenciador de filas disponibilizado é o PBS Pro, versão 11. Este sistema permite que a solicitação de execução de um programa não seja imediata, mas sim controlada por este sistema de filas, que verificará se existem recursos para execução. Deste modo, a solicitação de execução pode não ser imediatamente atendida como na execução em computador pessoal.

O cluster do CENAPAD-UFC possui 48 servidores Bullx B500 (cada um possuindo: 2 processadores Intel X5650 Hexa-Core, com frequência de 2,67 Ghz, 24GB de memória RAM). O CENAPAD-UFC disponibiliza ainda a seus usuários uma plataforma através da interface A2C como alternativa ao acesso via terminal. O gerenciamento dos recursos é feito pelo sistema SLURM Workload Manager, também mediante sistema de filas, com submissão da solicitação através de script. Em ambos os clusters, o compilador utilizado foi o gfortran.

6.2 PARÂMETROS DO OTIMIZADOR SLSQP

O método SLSQP (Sequential Least Square Programming) foi utilizado nas otimizações do presente trabalho. Esse algoritmo está implementado na biblioteca SciPy e invocado através da função minimize. Como se trata de problema de maximização, a função objetivo, quando calculada, foi multiplicada por -1. O método SLSQP permite a imposição de limites (bounds) e restrições (constraints). No caso da otimização do convergente, não foram impostas restrições para as variáveis, apenas foram impostos limites superior e inferior iguais aos raios de entrada e raio de garganta respectivamente. Os parâmetros utilizados estão na Tabela 28. A derivada foi calculada numericamente, através de CDS (Central differencing Scheme).

Tabela 28 – Parâmetros do Otimizador SLSQP

bounds	$R_{in} \in r_g$		
ftol	1,00E-04		
jac	derivada <i>CDS</i>		
Fonte – A autora (2021).			

6.3 OTIMIZAÇÕES NO CONVERGENTE

Com o objetivo de avaliar o efeito do número de variáveis e do tamanho da malha nos resultados, foram realizadas otimizações para obter máximo coeficiente de empuxo no vácuo, C_{fv} , com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis. A geometria da tubeira Proto-36 foi utilizada para obter os pontos iniciais que compõe o vetor de variáveis para a primeira malha (m1). Posteriormente utilizou-se as novas variáveis obtidas na otimização na malha m1 como dado inicial para a otimização na malha m2 e assim sucessivamente.

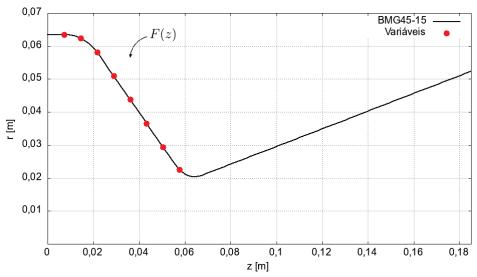
Nesse momento não foi utilizado MER no processo de otimização. Os parâmetros físicos utilizados nas otimizações são os mesmos apresentados na Seção 3, de Metodologia. Além disso, a malha base utilizada nas otimizações segue o mesmo padrão utilizado na verificação de solução (Tab. 10). As otimizações no convergente foram realizadas através da parametrização das variáveis distribuídas uniformemente, conforme mostra a Tab. 29.

Foram realizadas otimizações com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis no convergente. Em todos os casos, o divergente ficou fixo com as mesmas dimensões da Tubeira BMG45-15. Além do convergente, manteve-se constantes o raio de entrada R_{in} da tubeira e o raio de garganta r_t variando-se apenas a função F(z), conforme Fig. 27. As coordenadas z e r são distribuídas de maneira uniforme, conforme mostra a Tab. 29.

Tabela 29 — Coordenadas z e r utilizadas nas otimizações.

	z	r
1 var	3.24358E-02	4.0131E-02
2var	2.16239E-02	5.0943E-02
	4.32477E-02	2.9319E-02
4var	1.29743E-02	5.9323E-02
	2.59486E-02	4.6618E- 02
	3.89230E- 02	3.3643E-02
	5.18973E-02	2.3219E-02
6 var	9.26737E-03	6.1575E-02
	1.85347E-02	5.4032E-02
	2.78021E-02	4.4764E- 02
	3.70695E-02	3.5497E-02
	4.63369E- 02	2.6603E-02
	5.56042E-02	2.1763E-02
8var	7.20796E-03	6.2407E-02
	1.44159E-02	5.8111E-02
	2.16239E-02	5.0943E- 02
	2.88318E-02	4.3735E-02
	3.60398E-02	3.6527E-02
	4.32477E-02	2.9319E-02
	5.04557E-02	2.3945E- 02
	5.76636E-02	2.1185E-02

Figura 27 — Exemplo da distribuição de 8 variáveis no convergente da tubeira BMG45-15.



Fonte – A autora (2021).

A seguir são mostrados os resultados das otimizações nas malhas m3 (228x80), m4(456x160) e m5(912x320) e m6 (1824x640).

• Malha m3 (228x80):

Os resultados para a malha m3 com as variáveis 1, 2, 4, 6 e 8 são mostradas nas tabela 30 e Figura 28. Pode-se notar que o aumento da quantidade de variáveis resulta no aumento do valor de C_{fv} . Os valores Aum. 1, Aum. 2 e Aum 3. são os valores no aumento do empuxo com relação às tubeiras BMG45-15, Proto-36 e Proto-33 nessa ordem. Os valores do empuxo de tais tubeiras foram apresentados na Tabela 15, na Seção 4.4 sobre Verificação de Solução. A seguir, na tabela 31 são mostrados novamente os resultados com o estimador GCI. Os resultados na Tab. 31 são referentes à malha m6.

Na Tabela 30 são mostrados os valores de C_{fv} e do estimador GCI. Também são mostrados os números de chamadas à função objetivo, (F.O.), o número de chamadas ao Gradiente (Grad.) e o tempo total para a otimização.

Tabela 30 –	Resultados	da otimização	em malha	m3 e E	Estimador GCI.
Variáveis	1	2	4	6	8

Variáveis	1	2	4	6	8
C_{fv}	$1,6177 \pm 3,39\text{E-}02$	1,6239± 4,09E-02	$1,6275\pm 5,43\text{E-}02$	1,6307± 9,92E-02	1,6334± 1,88E-01
Aum. 1 [%]	2,41	1,58	1,81	2,01	2,18
Aum. 2 [%]	1,20	1,58	1,81	2,01	2,18
Aum. 3 [%]	1,22	1,60	1,83	2,03	2,20
N. iter.	4	5	8	9	13
F.O.	6	10	17	24	34
Grad.	4	5	8	9	13
tempo [h]	0,17	0,40	1,05	2,18	3,1

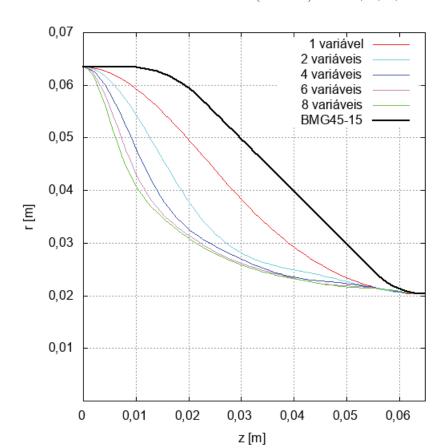


Figura 28 – Perfis otimizados na malha m
3 (228x80) com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis.

Tabela 31 – Valores do coeficiente de empuxo no vácuo e estimador U_{GCI} das tubeiras utilizadas para comparação.

	C_{fv}	U_{GCI}		
BMG45-15	1,5796	2,46E-03		
Proto-36	1,5985	2,77E-03		
Proto-33	1,5982	2,40E-03		
Fonte - A autora (2021).				

As coordenadas otimizadas são mostradas na Tab. 32.

Tabela 32 – Coordenadas resultantes da otimização na malha m3 com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis.

n_v	z	r			
1	0,0324358	0,035810530			
2	0,021623867	0,0356517			
	0,043247733	0,02427399			
4	0,01297432	0,04178097			
	0,02594864	0,0289337			
	0,03892296	0,02375369			
	$0,\!05189728$	0,02208549			
6	0,009267371	0,04479034			
	0,018534743	0,03255468			
	0,027802114	0,02705078			
	0,037069486	0,0240416			
	0,046336857	$0,\!02216532$			
	0,055604229	0,0214746			
8	0,007207956	0,04684321			
	0,01445911	0,03544827			
	$0,\!021623867$	0,02985583			
	0,028831822	$0,\!02632752$			
	0,036039778	0,02403865			
	0,043247733	0,02262281			
	0,050455689	$0,\!02162535$			
	0,057663644	0,02121969			
	Fonte – A autora (2021).				

Deve-se notar que foi possível calcular a estimativa para o erro numérico apenas para as malhas m3, m4, m5 e m6 pois são necessárias ao menos 3 malhas para estimar o erro numérico. No final de cada otimização, para cada resultado de tubeira foram realizadas mais duas simulações em malhas mais grossas com razão de refino igual a 2, sendo esses resultados utilizados para o cálculo das estimativas de erro. Então para cada nível de malha foram realizadas 10 simulações adicionais. Considerando os níveis m3, m4, m5 e m6, foram realizadas 40 simulações adicionais.

• Malha m4 (456x160):

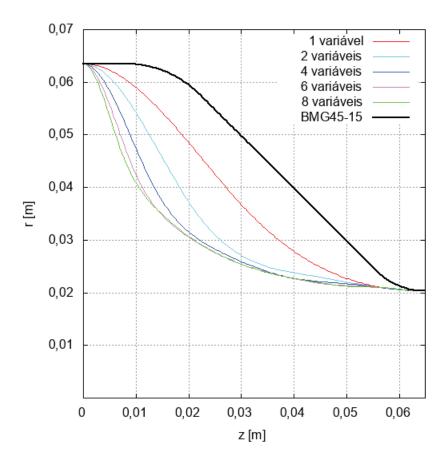
Os resultados da otimização na malha m4 com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis são mostrados na Tabela 33 e na Figura 29. Pode se notar que o aumento no coeficiente de empuxo fica aproximadamente na ordem de 2% para a tubeira BMG45-15 e na ordem de 1% para as tubeiras Proto-36 e Proto-33, pois, o erro numérico com o estimador GCI encontra-se na

segunda casa decimal.

Tabela 33 – Resultados da otimização em malha m4 e Estimador GCI.

Variáveis	1	2	4	6	8
C_{fv}	$1,608831 \pm 1,21\text{E-}02$	$1,6125 \pm 1,76\text{E-}02$	$1,6143\pm 2,27\text{E-}02$	1,6159± 3,48E-02	1,6172± 6,10E-02
Aum. 1 [%]	1,84	2,08	2,20	2,29	2,37
Aum. 2 [%]	0,64	0,87	0,99	1,08	1,16
Aum. 3 [%]	0,66	0,89	1,01	1,10	1,18
N. iter.	4	5	7	17	8
F.O.	6	10	17	42	30
Grad.	4	5	7	17	8
tempo [h]	18,8	34,2	81,3	319,7	200,4

Figura 29 – Otimizações com a malha m4 (456x160).



Coordenadas otimizadas são mostradas a seguir na Tab. 34.

Tabela 34 – Coordenadas resultantes da otimização na malha m
4 com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis.

n_v	z	r				
1	0,0324358	0,03418484				
2	0,021623867	0,03491313				
	0,043247733	$0,\!0232446$				
4	0,01297432	0,04086845				
	0,02594864	0,02780508				
	0,03892296	0,02295313				
	$0,\!05189728$	0,02153534				
6	0,009267371	0,04405858				
	0,018534743	0,03162273				
	0,027802114	0,02628834				
	0,037069486	0,02334875				
	0,046336857	0,0216121				
	0,055604229	0,02109305				
8	0,007207956	0,04682252				
	0,014415911	0,0354034				
	$0,\!021623867$	0,02960326				
	0,028831822	0,02591952				
	0,036039778	0,02352593				
	0,043247733	0,02215222				
	0,050455689	0,02121349				
	0,057663644	0,02094039				
	Fonte – A autora (2021).					

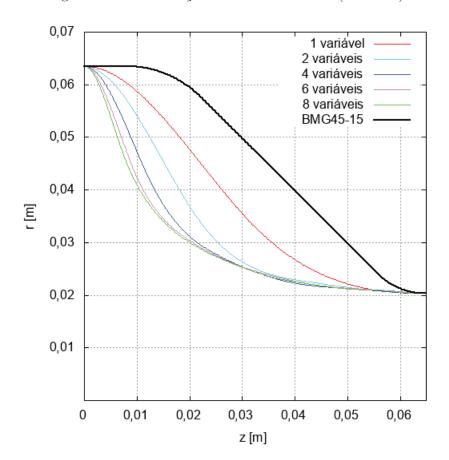
• Malha m5 (912x320):

Os resultados da otimização na malha m5 com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis são mostrados na Tabela 35 e na Figura 30. Pode se notar que o aumento no coeficiente de empuxo fica na ordem de 1,8% para a tubeira BMG45-15 e na ordem de 0,6% para as tubeiras Proto-36 e Proto-33.

Tabela 35 – Resultados da otimização em malha m5 e Estimador GCI.

	1	2	4	6	8
	$1,6054\pm$	1,6076±	1,6085±	1,6088±	1,6091±
C_{fv}	3,48E-03	5,85E-03	7,97E-03	1,12E-2	1,48E-02
Aum. 1 [%]	1,62	1,76	1,82	1,84	1,86
Aum. 2 [%]	0,43	$0,\!57$	0,62	0,64	0,65
Aum. 3 [%]	0.45	0,59	0,64	0,66	0,67
N. iter.	4	5	1	1	1
F.O.	6	10	5	5	6
Grad	4	5	1	1	1
tempo [h]	110,2	147,1	-	-	-

Figura 30 – Otimizações com a malha m5 (912x320).



As coordenadas otimizadas são mostradas na 36.

Tabela 36 – Coordenadas resultantes da otimização na malha m5 com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis.

n_v	Z	r			
1	0,0324358	0,0329221			
2	0,021623867	0,03443109			
	0,043247733	0,02245042			
4	0,01297432	0,040723056			
	0,02594864	0,027307332			
	0,03892296	0,022509292			
	$0,\!05189728$	0,021150479			
6	0,009267371	0,044002586			
	0,018534743	0,031414471			
	0,027802114	0,026238859			
	0,037069486	0,023321415			
	0,046336857	$0,\!021635456$			
	0,055604229	0,021002678			
8	0,007207956	0,047265743			
	0,014415911	0,034636656			
	0,021623867	0,029066278			
	0,028831822	0,025729613			
	0,036039778	0,023339582			
	0,043247733	0,022068729			
	0,050455689	0,021160142			
	0,057663644	0,020876431			
	Fonte – A autora (2021).				

• Malha m6 (1824x640):

Os resultados da otimização na malha m6 com 1, 2 e 4 variáveis são mostrados na Tab. 37 e na Fig. 31. Pode se notar que o aumento no coeficiente de empuxo fica no ordem de 1,6% com relação à tubeira BMG45-15 e na ordem de 0,4% para as tubeiras Proto-36 e Proto-33. Como esperado, os resultados de C_{fv} ma malha m6 apresentaram menor estimativa de erro. Entretanto nota-se em todos os resultados que o erro numérico aumenta com o número de variáveis.

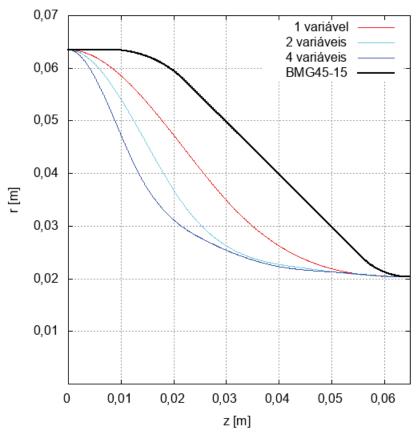


Figura 31 – Perfis otimizados na malha m6, com 1, 2, e 4 variáveis.

Tabela 37 – Resultado das otimizações na malha m6 com 1, 2, e 4 variáveis

	1	2	4
$\overline{C_{fv}}$	1,6045±9.28E-04	$1,6058 \pm 2.23$ E-03	$1,6059 \pm 3.59$ E-03
Aum. 1 [%]	1,57	1,65	1,66
Aum. 2 [%]	$0,\!37$	0.45	0.46
Aum. 3 [%]	0,39	$0,\!47$	0,48
N. iter.	1	1	1
F.O.	4	3	3
Grad	1	1	1
tempo [h]	169,1	146,0	-

Fonte – A autora (2021).

A Fig. 32 mostra os resultados de C_{fv} na malha m6 com o U_{GCI} . Pode-se ver que o empuxo aumenta com o número de variáveis, entretanto, o erro numérico é menor com 1 variável.

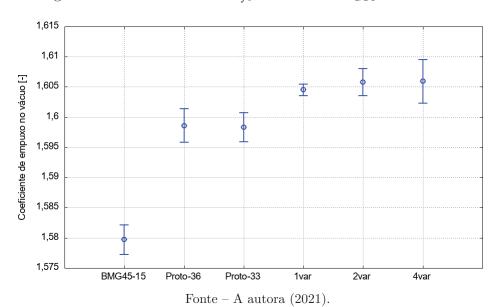


Figura 32 – Resultados do C_{fv} e estimador U_{GCI} na malha m6.

Tabela 38 – Coordenadas resultantes da otimização na malha m6 com 1, 2, e 4 variáveis.

n_v	z	r
1	0,0324	0,0323
2	0,0216	0,0344
	0,0432	0,0222
4	0,0129	0,0407
	0,0259	0,0273
	0,0389	0,0225
	0,0518	0,0211
Fonte	e – A auto	ra (2021).

• Estimadores:

A seguir são mostrados os resultados do coeficiente de empuxo e dos estimadores de erro obtidos com o aplicativo Richardson 4.1. Os resultados são mostrados de forma resumida nas Tabs. 39, 40, 41, 42 e 43. Pode-se verificar em todas as tabelas citadas que para o perfil com a mesma quantidade de variáveis, o refino de malha ocasiona a diminuição no erro estimado, como esperado.

Tabela 39 – Resultados da otimização com uma variável.

	1 variável							
n_v	C_{fv}	$C_{fv\infty}$	C_{fvC}	U_{GCI}	U_{MC}	U_m	U_C	
m1	1,6666	_	_	_	_	_	_	
m2	1,6358	_	_	_	_	_	_	
m3	1,6178	1,5985	1,5956	3,39E-02	-1,93E-02	8,40E-03	4,97E-03	
m4	1,6088	1,6004	1,6000	1,21E-02	-8,48E-03	1,84E-03	8,31E-04	
m5	1,6054	1,6028	1,6028	3,48E-03	-2,64E-03	-6,09E-04	1,96E-04	
m6	1,6045	1,6039	1,6039	9,28E-04	-5,68E-04	-6,98E-04	1,54E-04	

Tabela 40 – Resultados da otimização com duas variáveis.

	2 variáveis							
$\overline{n_v}$	C_{fv}	$C_{fv\infty}$	C_{fvC}	U_{GCI}	U_{MC}	U_m	U_C	
m1	1,6853	_	_	_	_	_	_	
m2	1,6462	_	_		_	_	_	
m3	1,6239	1,6002	1,5969	4,10E-02	-2,37E-02	9,99E-03	5,80E-03	
m4	1,6125	1,6013	1,6004	1,76E-02	-1,12E-02	3,70E-03	1,90E-03	
m5	1,6077	1,6034	1,6033	5,85E-03	-4,28E-03	6,61E-04	2,82E-04	
m6	1,6058	1,6040	1,6040	2,23E-03	-1,77E-03	2,44E-05	$8,\!81E-06$	

Tabela 41 – Resultados da otimização com quatro variáveis.

	4 variáveis							
n_v	C_{fv}	$C_{fv\infty}$	C_{fvC}	U_{GCI}	U_{MC}	U_m	U_C	
m1	1,7009	_	_	_	_	_	_	
m2	1,6534	_	_	_	_	_	_	
m3	1,6276	1,5997	1,5937	5,44E-02	-2,79E-02	1,43E-02	9,58E-03	
m4	1,6144	1,6011	1,5993	2,28E-02	-1,33E-02	5,50E-03	3,15E-03	
m5	1,6086	1,6028	1,6028	7,98E-03	-5,42E-03	1,38E-03	6,52E-04	
m6	1,6059	1,6032	1,6032	3,59E-03	-2,71E-03	2,82E-04	1,15E-04	

Tabela 42 – Resultados da otimização com seis variáveis.

				0 ./ .					
	6 variáveis								
n_v	C_{fv}	$C_{fv\infty}$	C_{fvC}	U_{GCI}	U_{MC}	U_m	U_C		
m1	1,7136	_	_	_	_	_	_		
m2	1,6597	_	_	_	_	_			
m3	1,6307	1,5984	1,5778	9,93E-02	-3,23E-02	2,35E-02	2,65E-02		
m4	1,6159	1,6004	1,5954	3,48E-02	-1,55E-02	9,26E-03	7,34E-03		
m5	1,6088	1,6014	1,6009	1,12E-02	-7,43E-03	2,14E-03	1,04E-03		

	8 variáveis							
n_v	C_{fv}	$C_{fv\infty}$	C_{fvC}	U_{GCI}	U_{MC}	U_m	U_C	
m1	1,7230	_	_	_	_	_	_	
m2	1,6647	_	_	_	_	_	_	
m3	1,6334	1,5989	1,5446	1,88E-01	-3,45E-02	2,96E-02	6,17E-02	
m4	1,6172	1,5993	1,5856	6,10E-02	-1,79E-02	1,36E-02	1,72E-02	
m5	1,6091	1,6002	1,5991	1,48E-02	-9,29E-03	3,21E-03	1,68E-03	

Tabela 43 – Resultados da otimização com oito variáveis.

6.3.1 OTIMIZAÇÃO COM MER

Foram realizadas otimizações no convergente extrapolando-se a solução das malhas m3, m4 e m5. Pode-se notar que houve redução no tempo de execução das simulações. Por exemplo, com 4 variáveis, com MER nas malhas 3, 4 e 5, o tempo de execução foi de 42,6 horas (Tab. 46), sendo que a malha 5 sem MER, e duas variáveis, o tempo gasto foi de 147,1 horas (Tab. 35). O erro numérico reduziu pouco em relação aos resultados sem MER, como mostra a tabela 45. A Tab. 44 mostra as coordenadas otimizadas.

Tabela 44 – Coordenadas resultantes da otimização com uso de MER nas malhas 3, 4 e 5 com 1, 2, 4 e 8 variáveis.

$\overline{n_v}$	z	r
1	0,03244	0,3228
2	0,02162	0,03407
	0,04325	0,02199
4	0,01297	0,03993
	0,02595	0,02763
	0,03892	0,02288
	0,05190	0,02113
8	0,00721	0,04682
	0,01442	0,03540
	0,02162	0,02960
	0,02883	0,02591
	0,03604	0,02357
	0,04325	0,02215
	0,05046	0,02126
	0,05766	0,02094

Fonte – A autora (2021).

Figura 33 – Perfis otimizados com utilização de MER, com 1, 2, 4 e 8 variáveis.

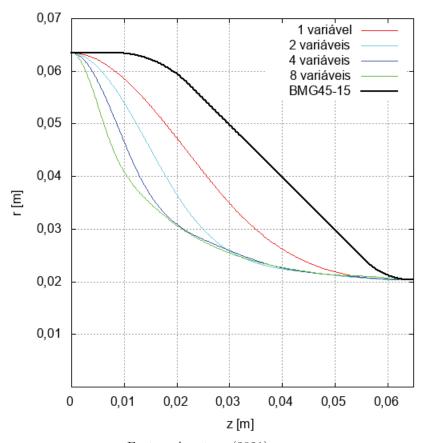


Tabela 45 – Resultado da otimização com uso de MER nas malhas 3, 4 e 5 e estimativas de erro.

n_v	C_{fv}	U_{GCI}	Cfv_{∞}	U_m
1	1,6052	2,46E-03	1,6035	-1,01E-03
2	1,6074	4,29E-03	1,6043	5,33E-04
4	1,6084	7,15E-03	1,6035	1,14E-03
8	1,6087	1,48E-02	1,5994	3,21E-03

Fonte – A autora (2021).

Aum. 3 [%]

Tempos [h]

2 1 4 8 $1,6052 \pm$ $1,6074 \pm$ $1,6084 \pm$ $1,6087 \pm$ C_{fv} 2,46E-034,29E-031,48E-027,15E-03Aum. 1 [%] 1,62 1,75 1,84 1,82 Aum. 2 [%] 0,420,55 0,620,63

0,43

22,1

Tabela 46 – Aumento no valor no coeficiente de empuxo C_{fv} e U_{GCI} para as otimizações com 1, 2, 4 e 8 variáveis na malha m5 e MER.

Fonte – A autora (2021).

0,57

42,6

0,64

86.5

0,65

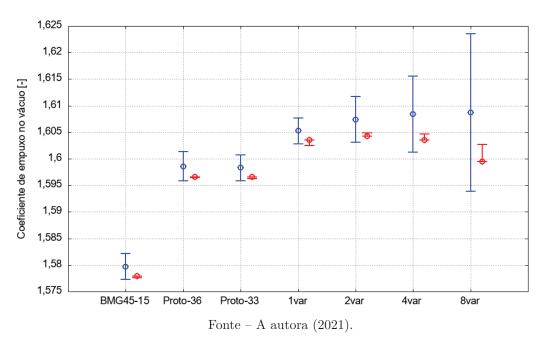
A Fig. 34 mostra os resultados de C_{fv} das tubeiras BMG45-15, Proto-36, Proto-33 e das tubeiras otimizadas com MER utilizando 1, 2, 4 e 8 variáveis. Observando a Fig. 33 e a Tab. 45 percebe-se que o erro numérico aumenta com a inclinação do convergente, ou seja, quando a não ortogonalidade da tubeira se torna mais severa. Essa tendência apareceu em todos as simulações e, apesar de o estimador GCI apresentar as maiores estimativas para o erro numérico, todos os estimadores amplificaram suas estimativas com o aumento de variáveis e/ou inclinação no convergente. Apesar dos perfis otimizados não serem definidos em termos de raio de curvatura e semiângulo de convergente, pode-se notar uma tendência similar à encontrada por Germer (2014) para C_{fv} : para razões de raios maiores que 1,5, quanto maior a inclinação do semiângulo do convergente, maior era o valor de C_{fv} . Pode-se notar uma forte inclinação da tubeira (tangente) até aproximadamente 0,015 m nas formas otimizadas.

Os campos de velocidades, pressão, número de Mach, temperatura e massa específica da tubeira otimizada com MER e 8 variáveis no convergente podem ser vistos nas Figs. 71 a 76 no Apêndice I. A Fig. 35 mostra os campos de Mach para a tubeira BMG45-15 e da tubeira otimizada com 4 variáveis. Pode-se notar a capacidade da solução numérica captar ondas de choques. A onda de choque parte da região da garganta e é refletida no eixo horizontal a uma distância pouco menor de 0,14 m na tubeira otimizada (0,136 m). A onda de choque da tubeira BMG45-15, entretanto é refletida no eixo horizontal a uma distância de aproximadamente 0,142 m (Fig. 35). A formação da onda de choque é prevista pela teoria (BACK; CUFFEL, 1966). De acordo com Back e Cuffel (1966) o pequeno raio de curvatura na tubeira BMG45-15 induz uma mudança na direção da quantidade de movimento do gás ao escoar da seção curva da garganta para a região cônica do divergente. Para que o escoamento fique paralelo à seção cônica ocorre uma compressão no fluido levando à uma formação de choque. Esta onda de choque se estende na direção axial, interceptando o eixo de simetria. Ela não tem a mesma natureza das ondas de choque formadas em escoamento superexpandido onde ocorre separação do escoamento por choque induzido (GERMER, 2014). Loth et al. (1992) explicam que a formação da onda de choque

ocorre devido à expansão rápida do escoamento logo após a garganta devido ao pequeno raio de curvatura.

Hill e Hopkins (1966), afirmam que em tubeiras cônicas com razões de raios maiores que 1,5, a variação na inclinação do semiângulo do convergente não desloca a linha sônica nem no eixo de simetria, nem na parede. Os autores afirmam que para essa configuração, o padrão de escoamento na região da garganta não é significativamente alterado. Entretanto, conforme as comparações em (a) e (b) da Fig. 35 pode-se afirmar que existe alteração no escoamento pois ocorre uma mudança, mesmo que pequena, na posição da interseção da linha sônica com o eixo de simetria. Porém, deve-se considerar que a tubeira da Fig. 35 (b) não possui semiângulo de convergente bem definido, mas um formato aproximadamente curvo.

Figura 34 – Resultados do C_{fv} e U_{GCI} (em azul) e $C_{fv\infty}$ e U_m (em vermelho) para a tubeira otimizada com 1, 2 4 e 8 variáveis e MER e para as tubeiras BMG45-15, Proto-36 e Proto-33.



As Figs. 36 a 40 mostram os campos de pressão, massa específica, velocidade na direção axial, na direção radial e temperatura para a tubeira BMG45-15 e para a tubeira resultante da otimização com 4 variáveis na malha m6. Pode-se observar a onda de choque formada mais a montante na tubeira otimizada, a uma distância de aproximadamente 0,136 m. Pode-se notar as linhas da onda de choque oblíqua mais suaves na Fig. 35 (b) em relação à (a). Ondas de choque ocasionam mudanças nas propriedades, a velocidade é reduzida enquanto que temperatura, pressão e massa específica são aumentadas de forma não isentrópica (ANDERSON, 1990). Portanto é desejável reduzir a intensi-

dade da onda de choque. Ao diminuí-la, tende-se a aumentar os valores de parâmetros de desempenho. As linhas mais suaves podem ser observadas nas demais figuras (Figs. 36 a 40).

Figura 35 – Campos de Mach para tubeira BMG45-15 (a) e tubeira otimizada com 4 variáveis e MER (b).

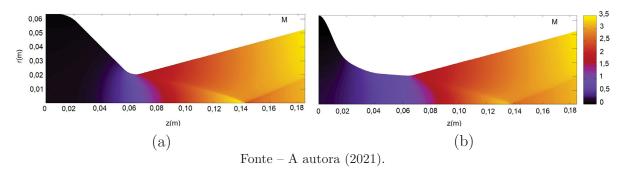


Figura 36 – Campos de pressões para tubeira BMG45-15 (a) e tubeira otimizada com 4 variáveis no convergente (b).

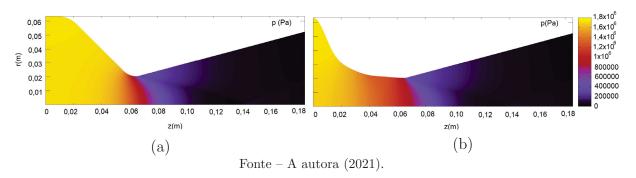


Figura 37 – Campos de massa específica para tubeira BMG45-15 (a) e tubeira otimizada com 4 variáveis no convergente (b).

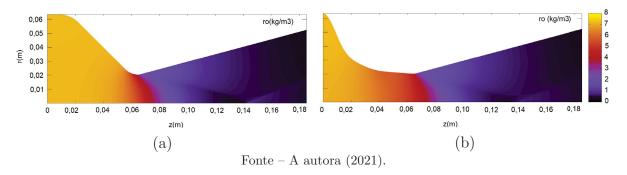


Figura 38 – Campos de velocidade u para tubeira BMG45-15 (a) e tubeira otimizada com 4 variáveis no convergente (b).

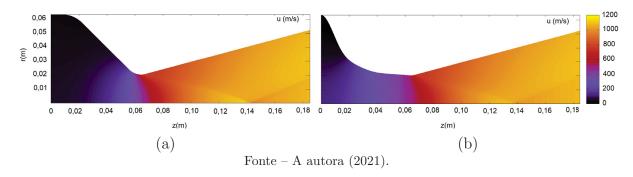


Figura 39 – Campos de velocidade v para tubeira BMG45-15 (a) e tubeira otimizada com 4 variáveis no convergente (b).

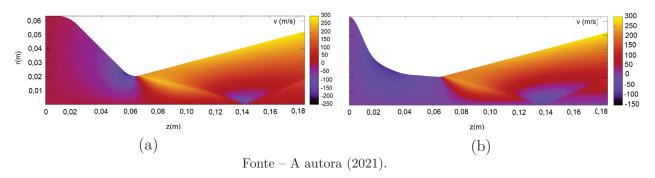
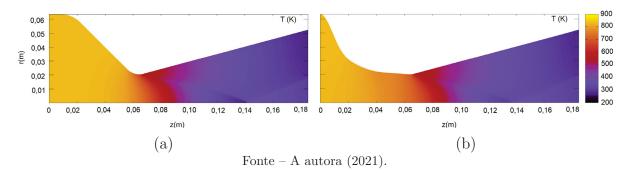


Figura 40 – Campos de temperatura T para tubeira BMG45-15 (a) e tubeira otimizada com 4 variáveis no convergente (b).



A Fig. 41 mostra a distribuição do número de Mach e das pressões da tubeira BMG45-15. São apresentados valores obtidos na parede, na região de simetria e no caso quasi-unidimensional (1D). As Figs. 42 a 45 mostram a distribuição do número de Mach e da pressão para as tubeiras otimizadas na malha m6 com 1, 2, 4 variáveis e com MER e 8 varáveis. O efeito de redução na intensidade do choque oblíquo pode ser visto também nessas figuras. Na Fig. 44 (a), por exemplo, o número de Mach na linha de simetria no

ponto situado a aproximadamente 0,136 m é menos abrupto e alcança valor maior na saída comparando com a tubeira BMG45-15. O valor do número de Mach na saída da tubeira otimizada com 4 variáveis é 3,11 e da tubeira BMG45-15 é 2,97, significando um aumento de 4,7%. Com relação aos valores Mach na parede, não houve aumento significativo.

Ao analisar os valores das pressões pode-se observar a redução na pressão no ponto da onda de choque. De fato, como explica Loth et~al.~(1992) o choque decorre da rápida expansão do fluxo logo a jusante da garganta devido ao pequeno raio de curvatura. No perfil geométrico da seção divergente da tubeira, ao atingir o ponto de intersecção entre o arco de circunferência e a curva subsequente (segmento de reta da seção cônica), ocorre a mudança na direção do escoamento na direção da parede do divergente, o que gera a elevação da pressão e a formação de uma onda de compressão. A onda de compressão se propaga e aumenta de intensidade até se tornar uma onda de choque na região próxima à simetria (GERMER, 2014). De fato, a relação entre a diminuição do raio R_{c2} e o aumento na intensidade do choque já havia sido detectado por Pirumov et~al.~(1974). A pressão relacionada à parede, nas tubeiras otimizadas, apresenta ainda um ponto bem definido na região da garganta em 0,0648 m aproximadamente, como mostra a Fig. 42. Em outros casos ocorre oscilação na pressão nesse ponto da parede localizado na garganta. Esse comportamento pode estar relacionado ao formato dos perfis otimizados na região pouco antes da garganta não se apresentar perfeitamente circular.

Figura 41 – Distribuição do número de Mach e das pressões na parede, no centro e da solução 1D da tubeira BMG45-15.

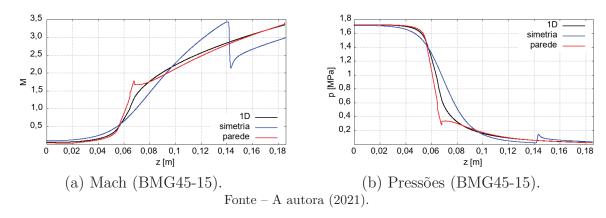


Figura 42 – Distribuição do número de Mach e das pressões na parede, no centro e da solução 1D da tubeira obtida na otimização com 1 variável no convergente.

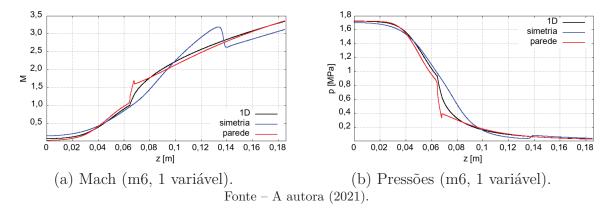


Figura 43 – Distribuição do número de Mach e das pressões na parede, no centro e da solução 1D da tubeira obtida na otimização com 2 variáveis no convergente.

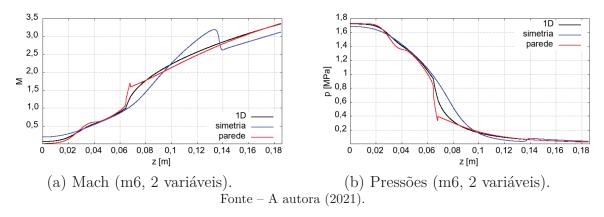


Figura 44 – Distribuição do número de Mach e das pressões na parede, no centro e da solução 1D da tubeira obtida na otimização com 4 variáveis no convergente.

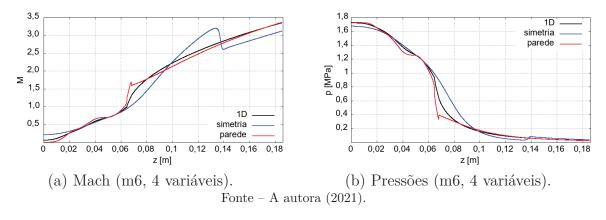
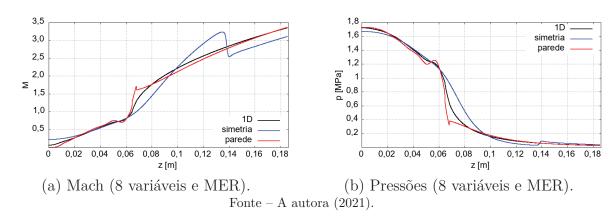


Figura 45 — Distribuição do número de Mach e das pressões na parede, no centro e da solução 1D da tubeira obtida da otimização com 8 variáveis no convergente e MER.



A Fig. 46 apresenta a linha sônica das tubeiras otimizadas na malha m6 com 1, 2 e 4 variáveis. Junto com cada solução pode-se ver a linha sônica da tubeira BMG45-15. Pode-se verificar que em todos os casos otimizados, a intercessão entre a linha sônica e o eixo de simetria se desloca a montante. Essa tendência fora evidenciada por Germer (2014) ao aumentar a razão de raios de tubeiras. Hill e Hopkins (1966) verificaram a mesma tendência para tubeiras com razões de raios menores que 1,5. Verifica-se também que o ponto da linha sônica que parte da parede se posiciona cada vez mais a jusante conforme se aumenta o número de variáveis. Verifica-se também que a intercessão entre a linha sônica e o eixo de simetria se desloca à jusante ao aumentar o número de variáveis, porém de forma menos significativa.

A Fig. 47 apresenta a linha sônica das tubeiras otimizadas na malha m5 com 6 e 8 variáveis e também da tubeira otimizada com MER e 8 variáveis. Pode-se notar a mesma tendência, ou seja, um deslocamento a montante com relação a linha sônica da BMG45-15, Com relação ao ponto de partida da linha sônica e a interseção com a linha de simetria, os resultados com 8 variáveis na malha m5 e com MER são bem semelhantes.

Figura 46 – Linhas sônicas (Mach=1) na tubeira BMG45-15 e nas tubeiras otimizadas com 1, 2 e 4 variáveis na malha m6.

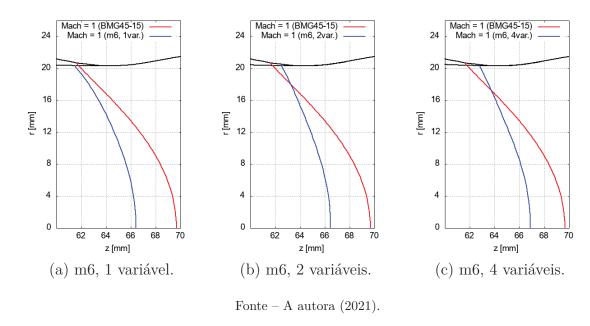
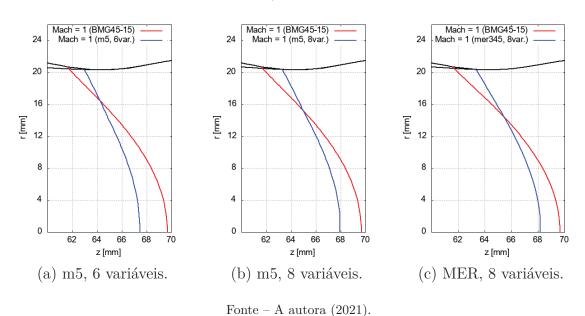


Figura 47 – Linhas sônicas (Mach=1) na tubeira BMG45-15; nas tubeiras otimizadas com 6 e 8 variáveis na malha m5; e na tubeira otimizada com MER e 8 variáveis.



6.3.2 RESUMO DAS OTIMIZAÇÕES NO CONVERGENTE

A tabela 47 mostra a identificação dos 24 perfis obtidos com otimização sem o uso de MER. Alguns desses perfis serão retomados na seção 6.4, sobre otimizações de toda a tubeira.

1var m3

1var m4

 $1 \text{var} \text{_m} 5$

1var_m6

m3

m4

 m_5

m6

COL	com o numero de variaveis e mama				
	1 variável	2 variáveis	4 variáveis	6 variáveis	8 variáveis
m1	1var_m1	2var_m1	4var_m1	6var_m1	8var_m1
m2	1var m2	2var m2	4var m2	6var m2	8var m2

2var m3

2var m4

 $2var_m5$

2var_m6

Tabela 47 – Resumo das otimizações sem uso de MER e identificação do teste de acordo com o número de variáveis e malha

Fonte – A autora (2021).

4var m3

4var m4

 $4var_m5$

 4var_{m6}

6var m3

6var m4

 $6var_m5$

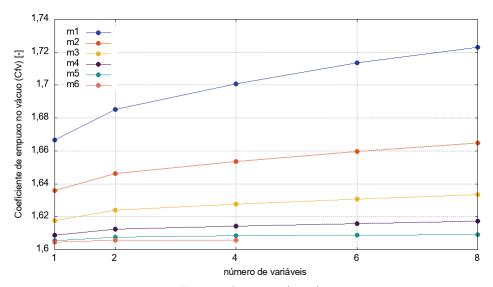
8var m3

8var m4

 $8var_m5$

A otimização na região do convergente é sensível ao nível de malha e quantidade de variáveis, como mostra a figura 48. Com o refino da malha, a quantidade de variáveis passa a ser menos significativa.

Figura 48 – Efeito da quantidade de variáveis e do tamanho da malha sobre o coeficiente de empuxo no vácuo.



Fonte – A autora (2021).

Pela análise dos resultados apresentados na seção anterior, pode-se notar que, para um mesmo nível de malha, o erro numérico aumenta com a quantidade de variáveis. Conforme mostra a tabela 48, ocorre redução na ordem aparente.

m5				
Variáveis	pu			
1	1,1136			
2	0,9103			
4	0,8444			
6	0,8217			
8	0,7790			
Fonte – A autora (2021)				

Tabela 48 – Ordem aparente das soluções na malha 5 com 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis

Mostrou-se também que, em concordância com os trabalhos da literatura, o convergente afeta os parâmetros de desempenho de forma significativa. Foi evidenciada a mesma relação entre o aumento da inclinação do semiângulo de convergente e o aumento de C_{fv} apresentados por Hill e Hopkins (1966) e Germer (2014). Apesar da geometria não ter sido estabelecida em termos da razão de raios ou semiângulo de convergente, pode-se observar que para otimizar C_{fv} , a geometria tende a apresentar forte inclinação no convergente seguido de inclinação suave, conforme previsto pela literatura.

Foi apresentado o efeito das geometrias otimizadas nas malhas mais finas com relação à onda de choque. Foi mostrado que a onda de choque se desloca a montante nas malhas otimizadas em relação à tubeira BMG45-15, utilizada para comparação. Ocorre também a suavização da intensidade da onda de choque nas tubeiras otimizadas.

Com relação a amplitude da linha sônica da garganta, foi mostrado que a intersecção entre a linha sônica das tubeiras otimizadas e o eixo de simetria se desloca a montante em relação à tubeira BMG45-15. Na maioria dos casos o ponto de partida da linha sônica da parede se deslocou a jusante conforme se aumentava o número de variáveis.

Na próxima seção serão apresentadas ainda as otimizações realizadas no divergente a partir das linhas de Mach obtidas da otimização do convergente somente. As otimizações realizadas desta forma podem ser mais rápidas pois se utilizam do método de Rao para obtenção da seção divergente, conforme será mostrado a seguir.

6.4 OTIMIZAÇÕES NO CONVERGENTE E DIVERGENTE DA TUBEIRA

O divergente é a região da tubeira mais amplamente estudada, contando com inúmeros trabalhos para maximização do coeficiente de empuxo. Pode-se citar os trabalhos de Rao (1958), Cai et al. (2007), Yumuşak e Eyi (2012), Moro e Marchi (2015), Jéger e Veress (2017), entre outros. Resultados de trabalhos numéricos da otimização na região do divergente mostram aumento no empuxo de 0,5% em relação aos resultados obtidos com a

otimização apresentada por Rao.

No presente trabalho o método de Rao será utilizado para a geração da região divergente da tubeira. De cordo com Rao (1958), os dados necessários para a utilização de seu método são: (a) os raios de curvatura na região do convergente e (b) divergente e (c) o número de Mach na saída da tubeira. Entretanto, o raio de curvatura na região convergente é utilizada para obter a linha de Mach que parte da garganta. No trabalho de Rao (1958) a linha de Mach em questão é gerada pelo método de Guderley e Hantsch (1947). No presente trabalho, utiliza-se a linha de Mach já obtida nas otimizações do convergente apresentados na Seção 3.5.

A obtenção do número de Mach na saída foi feita através do ajuste do comprimento da seção divergente. Ou seja, é possível determinar o Mach de saída impondo o comprimento desejado no divergente. Finalmente, o raio de curvatura no divergente foi de 1,5 mm em todas as soluções (necessário para que a solução com o programa MoCA convergisse).

A linha de Mach que parte da garganta pode ser vista na Fig. 49, adimensionalizada pelo raio r_g . A linha parte do ponto [0,1]. A Fig. 49 mostra ainda o valor de θ , que define o ângulo do vetor velocidade com relação ao eixo axial ao longo da linha de Mach.

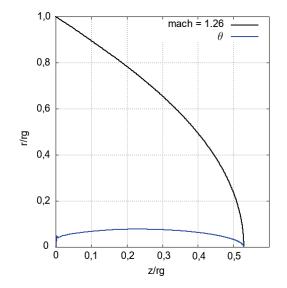


Figura 49 – Exemplo de linha de Mach utilizada para obtenção do divergente.

O programa computacional MoCA (disponível em: https://github.com/gbertoldo/MoCA) foi utilizado para obter o perfil otimizado no divergente a partir da linha de Mach, de θ e do número de Mach de saída (obtido pelo comprimento do divergente). O programa MoCA, versão 1p0, foi escrito para otimizar os perfis utilizando o método de Rao, conforme mostra o Apêndice E.

As otimizações utilizadas para obtenção do divergente com programa MoCA são

listados a seguir:

- Teste (a): Perfil obtido com 1 variável na malha m6;
- Teste (b): Perfil obtido com 2 variáveis na malha m6;
- Teste (c): Perfil obtido com 4 variáveis na malha m6;
- Teste (d): Perfil obtido com 6 variáveis na malha m5;
- Teste (e): Perfil obtido com 8 variáveis na malha m5;
- Teste (f): Perfil obtido com 8 variáveis com MER;

Em resumo, foi adotado seguinte procedimento:

1) Os perfis do convergente otimizados na malha m5 foram utilizados em simulação na malha m6 de modo a obter campo de Mach mais detalhado. Depois disso, a linha de Mach que parte da coordenada [0,1] foi obtida de todas as simulações listadas. As Figs. 50 e 51 mostram as linhas de Mach utilizadas na obtenção dos divergentes otimizados. As Figs. 50 e 51 mostram também a linha sônica, θ e a linha sônica para o caso quasi-unidimensional;

Figura 50 – Linhas sônicas para o caso quasi-unidimensional (1D), caso bidimensional, linha de Mach para obtenção do divergente e θ para as tubeiras otimizadas com 1, 2 e 4 variáveis na malha m6.

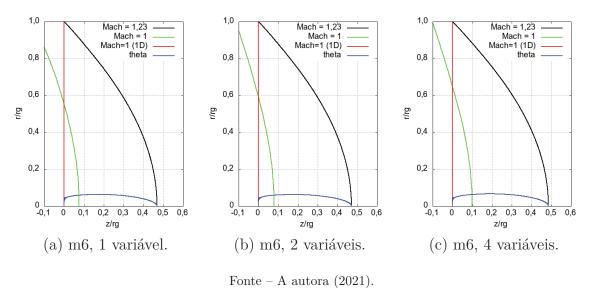
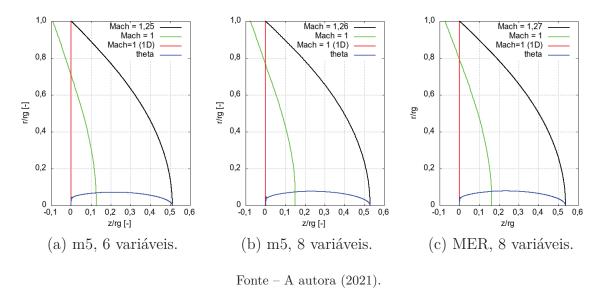


Figura 51 – Linhas sônicas para o caso quasi-unidimensional (1D), caso bidimensional, linha de Mach para obtenção do divergente e θ para as tubeiras otimizadas com 6 e 8 variáveis na malha m5; e na tubeira otimizada com MER e 8 variáveis.



- 2) Obtenção do perfil otimizado do divergente. Para isso, o programa computacional MoCA foi utilizado. Os dados de entrada do programa MoCA são: coordenadas z e r, a linha de Mach, θ e número de Mach. O número de Mach foi determinado iterativamente de modo que comprimento da região do divergente fosse mantido o mesmo;
- 3) O perfil final (unindo-se convergente e divergente otimizados) é resolvido na malha m6.

Os resultados das otimizações em toda a tubeira são mostradas nas Figs. 52 a 57. A Tab. 56 mostra os valores de C_{fv} , de $C_{fv\infty}$ e C_{fc} . Pode-se notar que a solução para o caso "c" foi o maior obtido exceto para C_{fc} , em que o caso "b" obteve maior valor. As menores estimativas para o erro numérico foram dadas pelo estimador convergente.

Tabela 49 – Resultados das otimizações no convergente e divergente pelo método de Rao e estimadores de erro de discretização.

Teste	C_{fv}	$C_{fv\infty}$	Cf_C	U_{GCI}	U_{MC}	U_m	U_C
a	1,6304	1,6313	1,6306	4,19E-04	9,33E-04	-2,39E-03	9,63E-05
b	1,6319	1,6314	1,6313	1,06E-03	-4,77E-04	-1,48E-03	2,40E-04
c	1,6323	1,6305	1,6305	2,59E-03	-1,81E-03	-1,05E-03	2,86E-04
d	1,6319	1,6286	1,6287	4,33E-03	-3,29E-03	-7,05E-04	2,29E-04
e	1,6310	1,6264	1,6264	5,83E-03	-4,59E-03	-2,69E-04	9,66E-05
f	1,6311	1,6264	1,6264	5,94E-03	-4,70E-03	-2,11E-04	7,64E-05

Tabela 50 – Resultados dos valores de C_{fv} e os aumentos percentuais obtidos das otimi-
zações no convergente e divergente pelo método de Rao.

Teste	C_{fv}	Aum. 1 [%]	Aum. 2 [%]	Aum. 3 [%]
a	1,6304	3,21	1,98	2,01
b	1,6319	3,30	2,08	2.10
c	1,6323	3,33	2,10	2,13
d	1,6319	3,30	2,08	2,10
e	1,6310	$3,\!24$	2,02	2,04
f	1,6311	3,25	2,03	2,05

As Figs. 52 a 57 mostram os campos de velocidades axial u, radial v, do número de Mach, da massa específica, da temperatura e da pressão para o teste "c". Pode-se notar devido ao novo formato do divergente, a onda de choque não se forma. Deve-se notar também que o diâmetro de saída no divergente foi alterado pelo método de Rao, de 0.052324 m para 0.0646 m aproximadamente.

Figura 52 – Campo de velocidade u(m/s) para o perfil otimizado com 4 variáveis no convergente e Método de Rao no divergente.

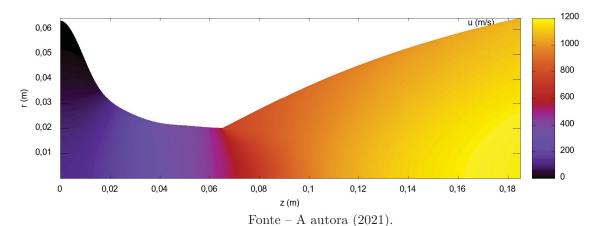


Figura 53 – Campo de velocidade v(m/s) para o perfil otimizado com 4 variáveis no convergente e Método de Rao no divergente.

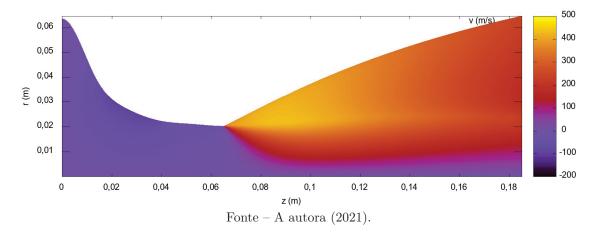


Figura 54 – Campo do número de Mach para o perfil otimizado com 4 variáveis no convergente e Método de Rao no divergente.

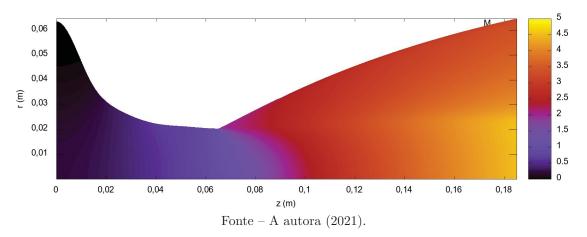


Figura 55 – Campo da massa específica (kg/m^3) para o perfil otimizado com 4 variáveis no convergente e Método de Rao no divergente.

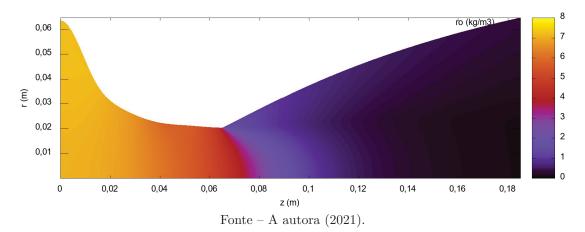


Figura 56 – Campo de temperatura T para o perfil otimizado com 4 variáveis no convergente e Método de Rao no divergente.

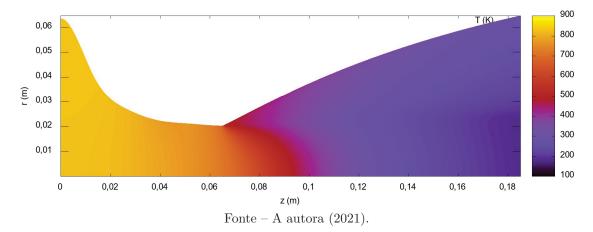
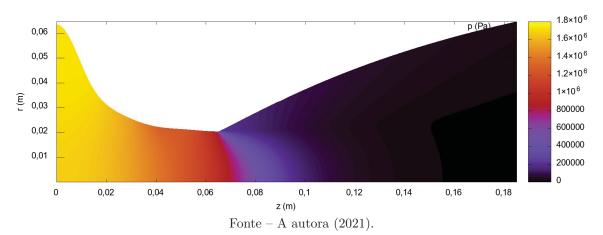


Figura 57 — Campo de pressão p para o perfil otimizado com 4 variáveis no convergente e Método de Rao no divergente.



As Figs. 58 a 60 mostram as distribuições do número de Mach e das pressões na parede das otimizações "a", "b", e "c". Pode-se verificar o aumento no número de Mach na linha de simetria para até aproximadamente 4,5 em todos os casos. Pode-se notar também, analisando as pressões, que não há formação do choque oblíquo, devido a forma otimizada do divergente.

Figura 58 – Distribuição do número de Mach e das pressões na parede, no centro e da solução 1D da tubeira obtida da otimização com 1 variável no convergente e método de Rao no divergente.

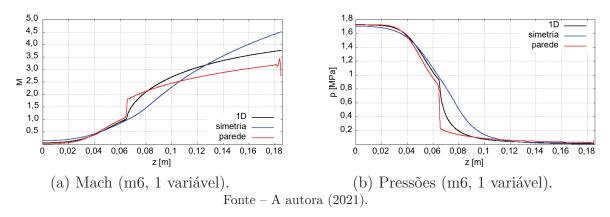


Figura 59 – Distribuição do número de Mach e das pressões na parede, no centro e da solução 1D da tubeira obtida da otimização com 2 variáveis no convergente e método de Rao no divergente.

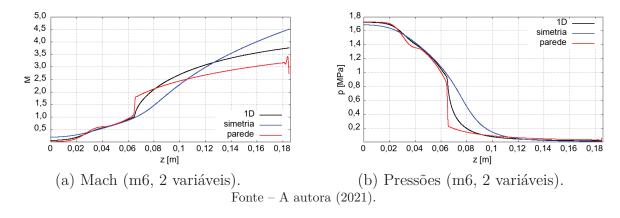
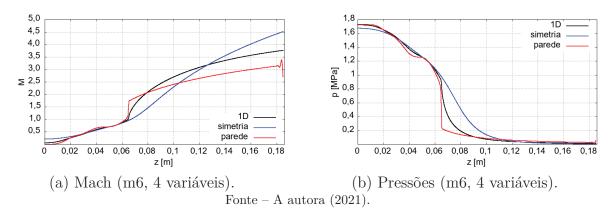


Figura 60 – Distribuição do número de Mach e das pressões na parede, no centro e da solução 1D da tubeira obtida da otimização com 4 variáveis no convergente e método de Rao no divergente.



7 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi proposta e implementada a otimização da região do convergente da tubeira BMG45-15. A geometria foi descrita por spline cúbica interpolante, com a utilização de 1, 2, 4, 6 e 8 variáveis na otimização. Um programa escrito em linguagem Python permitiu que o processo de otimização fosse realizado. O algoritmo de otimização escolhido foi o SLSQP. As soluções numéricas para a F.O. (C_{fv}) foram obtidas para seis níveis de malha. A verificação e validação foram realizadas de forma detalhada com base no trabalho de Back $et\ al.\ (1965)$. Os principais resultados obtidos neste trabalho são listados a seguir:

- Os resultados da otimização somente no convergente mostraram um aumento no coeficiente de empuxo no vácuo da ordem de 1,6 % ao utilizar 4 variáveis, otimizandose na malha m6. Isso mostra que a região do convergente é uma parte importante da tubeira;
- O método de MER foi utilizado no processo de otimização. Houve pequeno aumento no valor do coeficiente de empuxo, sendo que o maior efeito foi em relação a redução no tempo computacional;
- Uma metodologia para a otimização de toda tubeira utilizando o método de Rao foi apresentada. Com esta metodologia, pode se obter bons resultados para otimização do divergente com baixo custo computacional;
- O aumento total no coeficiente de empuxo, quando se otimiza toda a tubeira com a metodologia abordada é de até 3% com relação à tubeira base.

7.1 CONTRIBUIÇÕES

As principais contribuições obtidas com a realização deste trabalho são:

- Determinação da geometria de tubeiras para empuxo máximo (C_{fv}) ;
- Verificação e validação dos resultados computacionais obtidos pelo código Mach2D.
 Mostrar-se que o modelo invíscido e propriedades constantes possuem boa concordância com os resultados experimentais de (BACK et al., 1965);
- Utilização de MER com o objetivo de reduzir o tempo de processamento e aumentar a acurácia das soluções;
- Realizou-se a análise de sensibilidade da malha e quantidade de variáveis. Mostrou-se que os resultados são sensíveis com o nível de refinamento;

• Mostrou-se que a quantidade de variáveis interfere positivamente no valor de C_{fv} , quanto maior a quantidade de variáveis, maior é o valor de C_{fv} .

7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

As sugestões de trabalhos futuros são mencionadas a seguir. Uma melhor representação da geometria pode ser obtida pela utilização de outras expressões matemáticas, que necessitem quantidade menor de variáveis e que produzam menos oscilações. Sugere-se com isso, melhor investigação quanto ao formato ótimo obtido próximo à garganta. Sugere-se também a utilização de outros otimizadores, por exemplo os que são baseados em região de confiança.

A melhor representação do escoamento no interior das tubeiras pode ser importante na determinação da geometria ótima. Portanto, a aplicação de modelos físico-químicos mais realistas, tal como a utilização de escoamento viscoso, turbulento e de equilíbrio químico local, são melhorias que devem ser implementadas.

Sugere-se também a utilização de computação paralela para a realização das otimizações, uso de multigrid e implementação de esquemas de ordem maior que um, pois juntamente com o emprego de MER trariam melhorias nas ordens de acurácia das soluções.

REFERÊNCIAS

- AHLBERG, J. Truncated perfect nozzles in optimum nozzle design. **ARS Journal**, v. 31, n. 5, p. 614–620, 1961. Citado na página 19.
- ANDERSON, J. D. Modern compressible flow: with historical perspective. [S.l.]: McGraw-Hill New York, 1990. v. 12. Citado 3 vezes nas páginas 18, 54 e 109.
- ARAKI, L. K.; MARCHI, C. H. Effects of chemical and physical models on a one-dimensional flow in a rocket nozzle. **Journal of Aerospace Engineering**, v. 1, n. 2, p. 1, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 73 e 74.
- ARORA, J. S. Introduction to optimum design. [S.l.]: Elsevier, 2004. Citado na página 55.
- ASME. Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer: An American National Standard. [S.l.]: American Society of Mechanical Engineers, 2009. Citado 4 vezes nas páginas 63, 67, 73 e 84.
- BACK, L.; CUFFEL, R. Detection of oblique shocks in a conical nozzle with a circular-arc throat. **AIAA journal**, v. 4, n. 12, p. 2219–2221, 1966. Citado na página 108.
- BACK, L.; GIER, H.; MASSIER, P. Comparison of measured and predicted flows through conical supersonic nozzles, with emphasis on the transonic region. **AIAA Journal**, v. 3, n. 9, p. 1606–1614, 1965. Citado 23 vezes nas páginas 16, 17, 23, 31, 32, 37, 76, 77, 82, 83, 84, 85, 87, 89, 91, 92, 125, 148, 149, 150, 151, 152 e 163.
- BACK, L.; MASSIER, P.; GIER, H. Convective heat transfer in a convergent-divergent nozzle. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 7, n. 5, p. 549–568, 1964. Citado 4 vezes nas páginas 23, 34, 35 e 92.
- BERTOLDO, G. Otimização aerodinâmica de newton com base nas equações de navier-stokes. 2014. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 50.
- BIRD, R. B. Transport phenomena. **Appl. Mech. Rev.**, v. 55, n. 1, p. R1–R4, 2002. Citado na página 157.
- BOARD, S. S.; COUNCIL, N. R. et al. Pathways to exploration: rationales and approaches for a US program of human space exploration. [S.l.]: National Academies Press, 2014. Citado na página 22.
- CAI, G.; FANG, J.; XU, X.; LIU, M. Performance prediction and optimization for liquid rocket engine nozzle. **Aerospace Science and Technology**, Elsevier Masson, v. 11, n. 2-3, p. 155–162, 2007. Citado 6 vezes nas páginas 20, 21, 22, 28, 35 e 117.
- CAISSO, P. et al. A liquid propulsion panorama. Acta Astronautica, Elsevier, v. 65, n. 11-12, p. 1723–1737, 2009. Citado na página 21.
- CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Métodos numéricos para engenharia**. [S.l.]: McGraw-Hill, 2008. Citado na página 65.
- DRIKAKIS, D.; TSANGARIS, S. Real gas effects for compressible nozzle flows. 1993. Citado na página 36.

FARLEY, J. M.; CAMPBELL, C. E. Performance of several method-of-characteristics exhaust nozzles. 1960. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 35.

- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. [S.l.]: Springer-Verlag, 2002. Citado 6 vezes nas páginas 40, 45, 46, 63, 64 e 65.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Computational methods for fluid dynamics. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 43.
- FORTUNA, A. de O. **Técnicas computacionais para dinâminca dos fluidos:** conceitos básicos e aplicações. [S.l.]: Edusp, 2000. Citado na página 63.
- FREY, M.; MAKOWKA, K.; AICHNER, T. The tictop nozzle: a new nozzle contouring concept. **CEAS Space Journal**, Springer, v. 9, n. 2, p. 175–181, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 22, 31 e 35.
- GERMER, E. M. Avaliação do efeito da geometria da seção convergente em tubeiras de motor-foguete. Tese (Doutorado) Universidade Federal do Paraná, 2014. Citado 17 vezes nas páginas 23, 25, 33, 34, 35, 36, 76, 77, 79, 82, 83, 108, 112, 114, 117, 137 e 140.
- GUDERLEY, G.; HANTSCH, E. Optimum Shapes for Axially Symmetrical Supersonic Thrust Nozzles. [S.l.], 1947. Citado na página 118.
- GUIDE, F. U. V. 6.2. Fluent Inc., New Hampshire, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 33.
- HASLINGER, J. et al. Introduction to shape optimization: theory, approximation, and computation. [S.l.]: Siam, 2003. v. 7. Citado na página 55.
- HILL, D.; HOPKINS, D. Effect of small radius of curvature on transonic flow in axisymmetric nozzles. **AIAA Journal**, v. 4, n. 8, p. 1337–1343, 1966. Citado 6 vezes nas páginas 32, 34, 35, 109, 114 e 117.
- HOFFMAN, J. D. Design of compressed truncated perfect nozzles. **Journal of Propulsion and Power**, v. 3, n. 2, p. 150–156, 1987. Citado na página 19.
- HUSSAINI, M. M.; KORTE, J. J. Investigation of low-Reynolds-number rocket nozzle design using PNS-based optimization procedure. [S.l.]: Citeseer, 1996. Citado na página 20.
- INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. Fundamentos de transferência de calor e de massa, 4a edição. Livros Técnicos e Científicos Editora S/A. Rio de Janeiro, 1998. Citado na página 78.
- ISECG. The Global Exploration Roadmap. 2018. Disponível em: https://www.globalspaceexploration.org/wordpress/wp-content/isecg/GER_2018_small_mobile.pdf. Citado na página 21.
- JÉGER, C.; VERESS, Á. Novell application of cfd for rocket engine nozzle optimization. **Periodica Polytechnica Transportation Engineering**, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 29, 35 e 117.

KAMRAN, A.; GUOZHU, L. An integrated approach for optimization of solid rocket motor. **Aerospace Science and Technology**, Elsevier, v. 17, n. 1, p. 50–64, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 35.

- KIM, S. Calculations of low reynolds number rocket nozzles. In: **31st Aerospace Sciences Meeting**. [S.l.: s.n.], 1993. p. 888. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.
- KLIEGEL, J.; LEVINE, J. Transonic flow in small throat radius of curvature nozzles. **AIAA Journal**, v. 7, n. 7, p. 1375–1378, 1969. Citado 2 vezes nas páginas 73 e 143.
- KOCH, P. N.; EVANS, J. P.; POWELL, D. Interdigitation for effective design space exploration using isight. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 23, n. 2, p. 111–126, 2002. Citado na página 28.
- KRAFT, D. et al. A software package for sequential quadratic programming. Wiss. Berichtswesen d. DFVLR Brunswick, Germany, 1988. Citado 2 vezes nas páginas 135 e 136.
- KUMAR, G. M.; FERNANDO, D. X.; KUMAR, R. M. Design and optimization of de lavel nozzle to prevent shock induced flow separation. **Advances in Aerospace science and Applications**, v. 3, n. 2, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 35.
- LOTH, E.; BAUM, J.; LOHNER, R. Formation of shocks within axisymmetric nozzles. **AIAA journal**, v. 30, n. 1, p. 268–270, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 108 e 112.
- MALISKA, C. R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional . [S.l.]: Grupo Gen-LTC, 2017. Citado 9 vezes nas páginas 20, 39, 41, 45, 46, 48, 50, 63 e 139.
- MARCHI, C. *et al.* Repeated richardson extrapolation applied to the two-dimensional laplace equation using triangular and square grids. **Applied Mathematical Modelling**, Elsevier, v. 37, n. 7, p. 4661–4675, 2013. Citado na página 69.
- MARCHI, C.; MALISKA, C. A nonorthogonal finite-volume method for the solution of all speed flows using co-located variables. **Numerical Heat Transfer**, Taylor & Francis, v. 26, n. 3, p. 293–311, 1994. Citado na página 46.
- MARCHI, C. H. Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos. Florianópolis, SC, 2001. Citado 4 vezes nas páginas 64, 65, 67 e 68.
- MARCHI, C. H.; ARAKI, L. K. Relatório técnico do projeto cfd-10/ufpr: códigos mach2d 6.1 e rhg2d 1.0. **UFPR**, **Curitiba**, 2009. Citado na página 38.
- MARTINS, M. A. Multiextrapolação de Richardson com interpolação para reduzir e estimar o erro de discretização em CFD. Tese (Doutorado) Universidade Federal do Paraná, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 69 e 70.
- MEERBEECK, W. van; ZANDBERGEN, B.; SOUVEREIN, L. A procedure for altitude optimization of parabolic nozzle contours considering thrust, weight and size. In: **5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, Munich, Germany**. [S.l.: s.n.], 2013. p. 1–5. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 35.

MIR, I.; SAMO, S.; HUSSAIN, T.; ALI, I.; DURANI, H. Influence of convergent section length and angle on performance of supersonic nozzle. **Sindh University Research Journal-SURJ (Science Series)**, v. 49, n. 4, p. 727–732, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 25, 33 e 35.

- MORO, D. F.; MARCHI, C. H. Efeito da geometria do bocal divergente sobre o empuxo de motor-foguete operando no vácuo. **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**, v. 3, n. 2, 2015. Citado na página 117.
- NASA. **NASA Strategic Plan 2018**. 2018a. Disponível em: https://www.nasa.gov/sites/default/files/atoms/files/nasa_2018_strategic_plan.pdf. Citado na página 21.
- NASA. National Space Exploration Campaign Report. 2018b. Disponível em: https://www.nasa.gov/sites/default/files/atoms/files/nationalspaceexplorationcampaign.pdf>. Citado na página 22.
- NASA. **Space Launch System**. 2021. Disponível em: https://www.nasa.gov/exploration/systems/sls/index.html. Citado na página 21.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. Numerical optimization. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006. Citado 4 vezes nas páginas 54, 133, 134 e 135.
- OBERKAMPF, W. L.; ROY, C. J. Verification and validation in scientific computing. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 65 e 72.
- OLIVEIRA Jr., A. A. d. Otimização numérica de coeficiente de arrasto de nariz de foguete em escoamento supersônico. Tese (Doutorado) Universidade Federal do Paraná, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 70 e 71.
- PATANKAR, S. V. Numerical heat transfer and fluid flow. [S.l.]: CRC press, 2018. Citado na página 46.
- PATHAN, K. A.; DABEER, P.; KHAN, S. A. Optimization of area ratio and thrust in suddenly expanded flow at supersonic mach numbers. **Case studies in thermal engineering**, Elsevier, v. 12, p. 696–700, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 35.
- PIRUMOV, U.; ROSLYAKOV, G.; SUKHORUKOV, V. Investigation of supersonic flows in conical nozzles. **Fluid Dynamics**, Springer, v. 9, n. 3, p. 415–420, 1974. Citado na página 112.
- QUINTAO, K. K. Design optimization of nozzle shapes for maximum uniformity of exit flow. 2012. Citado na página 21.
- RADTKE, J. J. Otimização da geometria da seção divergente de tubeiras de motores-foguete. Tese (Doutorado) Universidade Federal do Paraná, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 74.
- RAO, G. Recent developments in rocket nozzle configurations. **ARS journal**, v. 31, n. 11, p. 1488–1494, 1961. Citado na página 20.
- RAO, G. V. R. Exhaust nozzle contour for optimum thrust. **Journal of Jet Propulsion**, v. 28, n. 6, p. 377–382, 1958. Citado 12 vezes nas páginas 19, 20, 25, 27, 35, 93, 117, 118, 143, 144, 145 e 147.

ROACHE, P. J. Fundamentals of computational fluid dynamics. [S.l.]: Hermosa Publishers Albuquerque, NM, 1998. v. 2. Citado 4 vezes nas páginas 63, 65, 79 e 82.

- ROY, C. Review of discretization error estimators in scientific computing. In: **48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition**. [S.l.: s.n.], 2010. p. 126. Citado na página 66.
- ROY, C. J. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 205, n. 1, p. 131–156, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 65 e 76.
- RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. d. R. Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais. [S.l.]: Makron Books do Brasil, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 57.
- SCHOMBERG, K.; OLSEN, J.; DOIG, G. Design of high-area-ratio nozzle contours using circular arcs. **Journal of Propulsion and Power**, American Institute of Aeronautics and Astronautics, v. 32, n. 1, p. 188–195, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 35.
- SHUEN, J.-S. Upwind differencing and lu factorization for chemical non-equilibrium navier-stokes equations. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 99, n. 2, p. 233–250, 1992. Citado na página 28.
- SMITH, T.; PAVLI, A.; KACYNSLI, K. Comparison of theoretical and experimental thrust performance of a 1030: 1 area ratio rocket nozzle at a chamber pressure of 2413 kn/sq m (350 psia). In: **23rd Joint Propulsion Conference**. [S.l.: s.n.], 1987. p. 2069. Citado na página 28.
- STARK, R.; GÉNIN, C.; SCHNEIDER, D.; FROMM, C. Ariane 5 performance optimization using dual-bell nozzle extension. **Journal of Spacecraft and Rockets**, American Institute of Aeronautics and Astronautics, p. 743–750, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 35.
- STROSKI, P. N. Museum of Cosmonautics and Rocket Technology in Saint Petersburg. 2018. Disponível em: https://www.electricalelibrary.com/en/2018/01/15/museum-of-cosmonautics-and-rocket-technology-in-saint-petersburg. Citado na página 18.
- SUSHMA, L.; DEEPIK, A.; SUNNAN, S.; MADHAVI, M. Cfd investigation for different nozzle jets. **ICAAMM**, v. 4, n. 8, p. 9087–9094, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 35.
- SUTTON, G. P.; BIBLARZ, O. Rocket propulsion elements. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016. Citado 4 vezes nas páginas 19, 23, 27 e 53.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. Computational fluid dynamics and heat transfer. Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 43.
- TURNER, M. J. Rocket and spacecraft propulsion: principles, practice and new developments. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008. Citado na página 53.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. [S.l.]: Pearson education, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 63.

WHITE, F. Mecânica dos Fluidos, 4^aedição, 2002. [S.l.]: McGraw-Hill, 2002. Citado 8 vezes nas páginas 16, 23, 37, 153, 154, 155, 156 e 157.

XING, X.; DAMODARAN, M. Aerodynamic shape design of nozzles using a hybrid optimization method. 2004. Citado 3 vezes nas páginas 21, 30 e 35.

YUMUŞAK, M.; EYI, S. Design optimization of rocket nozzles in chemically reacting flows. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 65, p. 25–34, 2012. Citado 5 vezes nas páginas 21, 22, 28, 35 e 117.

ZHANG, C.; ZHANG, J. Interpolation strategies in repeated richardson extrapolation. **Journal of Intelligent & Fuzzy Systems**, IOS Press, v. 31, n. 6, p. 2935–2939, 2016. Citado na página 69.

ZHU, M.; FU, L.; ZHANG, S.; ZHENG, Y. Design and optimization of three-dimensional supersonic asymmetric truncated nozzle. **Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 232, n. 15, p. 2923–2935, 2018. Citado na página 29.

APÊNDICE A - PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL

O método de otimização utilizado neste trabalho foi o método de programação de mínimos quadrados sequencial, do inglês, Sequential Least Squares Programming Algorithm (SLSQP). Esse método faz parte do conjunto maior de métodos de otimização determinísticos, não-lineares. Nesse grupo, para problemas sem restrições, encontam-se métodos conhecidos, tal como o Método Newton-Raphson, Gradiente Conjugado, Quase-Newton, entre outros. E para problemas com restrições destacam-se a Programação Quadrática Sequencial (PQS) e o método Lagrangiano Aumentado. O médoto SLSQP trata-se de algoritmo do tipo PQS.

De forma geral, problemas de programação não-linear com restrições de igualdade e desigualdade são, em grande maioria, de difícil resolução. O método da PQS consiste em resolver uma sequência de problemas mais simples cujas soluções convirjam para o problema original. Para exemplificar, considere a Eq. A.1 como um problema de otimização não-linear com restrições de igualdades e desigualdades:

$$\min f(x)
s.a c(x) = 0
g(x) \le 0,$$
(A.1)

onde a f(x): $\Re^n \to \Re$ é a função objetivo do problema, e $h: \Re^n \to \Re^m$ e $g: \Re^n \to \Re^p$ funções com derivadas primeiras contínuas. Por simplicidade, considere o seguinte problema não-linear com restrições de igualdade apenas, conforme mostra a Eq. A.2

$$\min \quad f(x)
s.a \quad c(x) = 0.$$
(A.2)

A ideia da PQS é, a cada passo z_k , formular e solucionar o subproblema quadrático como uma boa solução para o problema final, e definir o minimizador deste subproblema como o iterando x^{k+1} . Pode ser mostrado que a direção de busca é análoga à direção de busca do método de Newton para solução de problemas não lineares (NOCEDAL; WRIGHT, 2006). Assim como no método de Newton, é necessário estabelecer as condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) para o problema.

Sabe-se que a função lagrangiana para este problema é $\mathcal{L}(x,y) = f(x) - \lambda^T c(x)$. A matriz jacobiana das restrições é denotada por A(x):

$$A(x)^{T} = [\nabla c_1(x), \nabla c_2(x), \dots \nabla c_m(x)], \tag{A.3}$$

onde $c_i(x)$ é a *i*-ésima componente do vetor c(x). As condições KKT de primeira ordem para o problema podem ser escritas como um sistema de n+m equações e n+m incógnitas

 $x \in \lambda$.

$$F(x,\lambda) = \begin{bmatrix} \nabla f(x) - A(x)^T \lambda \\ c(x) \end{bmatrix} = 0.$$
 (A.4)

Se x^* é a solução ótima do problema dado pela Eq. A.2 e $A^* = A(x^*)$ tem posto¹ completo, então existe $\lambda^* \in R^m$ tal que (x^*,λ^*) satisfaz A.4. Com isso pode-se aplicar o método de Newton para a equação não-linear A.4. O Jacobiano da Eq. A.4 em relação a x e λ é dado por:

$$F'(x,\lambda) = \begin{bmatrix} H(x,\lambda) & -A^T(x) \\ A(x) & 0 \end{bmatrix}, \tag{A.5}$$

em que H denota a hessiana do Lagrangiano, ou seja,

$$H(x,\lambda) = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x,\lambda). \tag{A.6}$$

Assim, o passo de Newton para a iteração (x^k, λ^k) é dado por:

$$\begin{bmatrix} x^{k+1} \\ \lambda^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^k \\ \lambda^k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p^k \\ p^{\lambda} \end{bmatrix}$$
 (A.7)

em que p^k e p^λ resolvem o sistema KKT.

$$\begin{bmatrix} H_k & -A_k^T \\ A_k & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p^k \\ p^{\lambda} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f_k - A_k^T \lambda^k \\ c^k \end{bmatrix}. \tag{A.8}$$

Esta iteração é bem definida quando a matriz KKT é não singular. Esta não singularidade é consequência das hipóteses de Newton, que são transcritas a seguir conforme listadas por Nocedal e Wright (2006):

- 1. A matriz Jacobiana das restrições A_k tem posto completo;
- 2. A matriz H_k é definida positiva no espaço tangente das restrições, isto é, $d^T H_k d > 0$ para todo $d \neq 0$ tal que $A_k d = 0$.

A iteração de Newton apresenta convergência quadrática sob as hipóteses mencionadas e constitui-se em um excelente algoritmo para resolver problemas com restrições de

Posto ou característica (ou do inglês rank) é o número de linhas não nulas de uma matriz, quando escrita na forma escalonada por linhas. Equivalentemente, corresponde ao número de linhas ou colunas linearmente independentes da matriz. A característica de uma matriz tem várias implicações em relação à independência linear e à dimensão de um espaço vetorial.

igualdade, desde que o ponto inicial esteja suficientemente próximo de x^* . Supondo que a iteração (x^k, λ^k) não seja a solução do problema quadrático. Define-se o subproblema quadrático como sendo:

$$\min_{p} f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T H_k p$$
s.a
$$A_k p + c_k = 0.$$
(A.9)

Se as hipóteses de Newton são verificadas, então este problema tem solução única pelos vetores \bar{p}^k e $\bar{\lambda}^k$. Pelas condições KKT existe $\bar{\lambda}^k$ tal que:

$$H_k \bar{p}^k + \nabla f_k - A_k^T \bar{\lambda}^k = 0$$

$$A_k \bar{p}^k + c_k = 0.$$
(A.10)

O vetor ($\bar{p}^k, \bar{\lambda}^k$) pode ser identificado como uma solução das equações de Newton (Eq. A.8). Subtraindo-se $A_k^T \bar{\lambda}^k$ dos dois lados da Eq. A.8, obtém-se:

$$\begin{bmatrix} H_k & -A_k^T \\ A_k & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p^k \\ \lambda^{k+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f_k \\ c^k \end{bmatrix}$$
 (A.11)

Assim, pela não singularidade da matriz dos coeficientes, tem-se que $\bar{p^k} = p^k$ e $\bar{\lambda}^k = \lambda^{k+1}$. Com isso, a solução da nova iteração é dada a partir da solução do problema quadrático ou método de Newton. O algoritmo do método de Programação Quadrática Sequencial é dado por:

Tabela 51 – Algoritmo do método de Programação Quadrática Sequencial (PQS)

```
Algoritmo:

Escolha de x_0 e \lambda_0

Para k=0, 1, 2, 3 ..., faça

Calcule f_k, \nabla f_k, H_k, c_k, e A_k

Resolva o problema dado em A.9 para obter \bar{p}^k e o multiplicador \bar{\lambda}^k

Faça x^{k+1} = x^k + \bar{p}^k e \lambda^{k+1} = \bar{\lambda}^k

Se convergir, então

Pare com solução aproximada (x^{k+1}, \lambda^{k+1})
```

FIM

É possível evitar o cálculo da matriz hessiana H_k através da fatorização de Choleski, conforme descrito por Nocedal e Wright (2006) e Kraft et al. (1988). A fatoração da matriz hessiana H pode ser escrita da seguinte forma:

$$H_k = LDL^T (A.12)$$

onde L é a matriz triangular inferior, D é a matriz diagonal, positiva. Conforme explicado por Kraft $et\ al.\ (1988)$, a PQS resulta em no subproblema linear de mínimos quadrados.

APÊNDICE B – COEFICIENTES E TERMOS FONTE DOS SISTEMAS DAS EQUAÇÕES LINEARES

Os coeficientes da Eq. 3.32 para as velocidades u e v são apresentadas a seguir. A expressão 3.32 é reescrita para facilidade de leitura.

$$a_P \Phi_P + a_w \Phi_W + a_e \Phi_E + a_s \Phi_S + a_n \Phi_N + + a_{sw} \Phi_{SW} + a_{nw} \Phi_{NW} + a_{se} \Phi_{SE} + a_{ne} \Phi_{NE} + b_P = 0,$$
(B.1)

onde Φ é uma propriedade genérica. Sabendo-se que C^{ϕ} assume valor 1 nas equações da conservação da massa e da quantidade de movimento em x e y, e c_p na equação da conservação energia. Os termos $a_{sw}^{\phi}\Phi_{SW}=a_{se}^{\phi}\Phi_{SE}=a_{nw}^{\phi}\Phi_{NW}=a_{ne}^{\phi}\Phi_{NE}=0$, portanto, a Eq. B.1 pode ser reescrita como:

$$a_P^{\phi} \Phi_P + a_e^{\phi} \Phi_E + a_w^{\phi} \Phi_W + a_n^{\phi} \Phi_N + a_s^{\phi} \Phi_S + b_P^{\phi} = 0.$$
 (B.2)

Os coeficientes e termo fonte para estas equações, com base em B.2, são expressos por (transcritos de Germer (2014)):

$$a_e^{\phi} = C_P^{\phi} r_e U_e \rho_e \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right) \Delta \eta, \tag{B.3}$$

$$a_w^{\phi} = -C_P^{\phi} r_w U_w \rho_w \left(\frac{1}{2} - \alpha_w\right) \Delta \eta, \tag{B.4}$$

$$a_n^{\phi} = C_P^{\phi} r_n U_n \rho_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n\right) \Delta \xi, \tag{B.5}$$

$$a_s^{\phi} = -C_P^{\phi} r_s U_s \rho_s \left(\frac{1}{2} - \alpha_s\right) \Delta \xi, \tag{B.6}$$

$$a_P^{\phi} = \frac{r_P C_P^{\phi} \rho_P}{J_P} \frac{\Delta \eta \Delta \xi}{\Delta t} - (a_w^{\phi} + a_e^{\phi} + a_s^{\phi} + a_n^{\phi}), \tag{B.7}$$

$$b_P^{\phi} = \frac{r_P C_P^{\phi} \rho_P^0 \phi_P^0}{J_P} \frac{\Delta \eta \Delta \xi}{\Delta t} + r_P b_P^{P\phi}, \tag{B.8}$$

observando-se que:

$$\alpha_e = \begin{cases} 1/2, \text{ se } U_e \ge 0, \\ -1/2, \text{ se } U_e < 0, \end{cases}$$
 (B.9)

$$\alpha_w = \begin{cases} 1/2, \text{ se } U_w \ge 0, \\ -1/2, \text{ se } U_w < 0, \end{cases}$$
 (B.10)

$$\alpha_n = \begin{cases}
1/2, & \text{se } V_n \ge 0, \\
-1/2, & \text{se } V_n < 0,
\end{cases}$$
(B.11)

$$\alpha_s = \begin{cases} 1/2, & \text{se } V_s \ge 0, \\ -1/2, & \text{se } V_s < 0, \end{cases}$$
(B.12)

Para a conservação da quantidade de movimento em x, o termo fonte resulta:

$$b_P^{Pu} = \left((r_\xi)_n \frac{p_N + p_P}{2} - (r_\xi)_s \frac{p_S + p_P}{2} \right) \Delta \xi - \left((r_\eta)_e \frac{p_E + p_P}{2} - (r_\eta)_w \frac{p_W + p_P}{2} \right) \Delta \eta, \tag{B.13}$$

Para a conservação da quantidade de movimento em y, o termo fonte é:

$$b_P^{P^v} = \left((r_\eta)_e \frac{p_E + p_P}{2} - (r_\eta)_w \frac{p_W + p_P}{2} \right) \Delta \eta - \left((r_\xi)_n \frac{p_N + p_P}{2} - (r_\xi)_s \frac{p_S + p_P}{2} \right) \Delta \xi, \tag{B.14}$$

Para a conservação da energia, o termo fonte é dado por:

$$b_{P}^{PT} = \frac{1}{J} \left(p_{P} - p_{P}^{0} \right) \frac{\Delta \eta \Delta \xi}{\Delta t} + \\
- (1/2) u_{P} \left[(r_{\xi})_{n} (p_{N} + P_{P}) - (r_{\xi})_{s} (p_{S} + p_{P}) \right] \Delta \xi + \\
+ (1/2) u_{P} \left[(r_{\eta})_{e} (p_{E} + p_{P}) - (r_{\eta})_{w} (p_{W} + p_{P}) \right] \Delta \eta + \\
- (1/2) v_{P} \left[(z_{\eta})_{e} (p_{E} + p_{P}) - (z_{\eta})_{w} (p_{W} + p_{P}) \right] \Delta \eta + \\
+ (1/2) v_{P} \left[(z_{\xi})_{n} (p_{E} + p_{P}) - (z_{\xi})_{w} (p_{S} + p_{P}) \right] \Delta \xi +$$
(B.15)

APÊNDICE C – COEFICIENTES E TERMOS FONTE DA EQUAÇÃO DE CORREÇÃO DE PRESSÃO

A equação da conservação da massa é usada para obter a correção da pressão. Para obter estes coeficientes foi utilizado o método SIMPLEC (MALISKA, 2017). Considerando a forma geral:

$$a_P^{p'}p'_P + a_w^{p'}p'_W + a_e^{p'}p'_E + a_s^{p'}p'_S + a_n^{p'}p'_N + b_P^{p'} = 0, (C.1)$$

cujos coeficientes são:

$$a_P^{p'} = \begin{bmatrix} = \frac{r_P}{J_P \Delta t} + r_e \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right) U_e \Delta \eta - \left(\frac{1}{2} - \alpha_w\right) U_w \Delta \eta + \\ + r_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n\right) V_n \Delta \eta - r_s \left(\frac{1}{2} - \alpha_s\right) V_s \Delta \xi \end{bmatrix} \frac{1}{RT_P} + A'$$
 (C.2)

$$A' = \frac{r_e \rho_e d_{Ue}^P \Delta \eta \Delta \xi + r_w \rho_w d_{Uw}^P \Delta \eta \Delta \xi +}{+ r_n \rho_n d_{Vn}^P \Delta \eta \Delta \xi + r_s \rho_s d_{Vs}^P \Delta \eta \Delta \xi}, \tag{C.3}$$

$$a_E^{p'} = r_e \Delta \eta \left\{ \left[\left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) U_e \right] \frac{1}{RT_E} - \rho_e d_{Ue}^P \Delta \xi \right\}, \tag{C.4}$$

$$a_W^{p'} = -r_w \Delta \eta \left\{ \left[\left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) U_w \right] \frac{1}{RT_W} - \rho_w d_{Uw}^P \Delta \xi \right\}, \tag{C.5}$$

$$a_N^{p'} = r_n \Delta \xi \left\{ \left[\left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) V_n \right] \frac{1}{RT_N} - \rho_n d_{Vn}^P \Delta \eta \right\}, \tag{C.6}$$

$$a_S^{p'} = -r_s \Delta \xi \left\{ \left[\left(\frac{1}{2} - \alpha_s \right) V_s \right] \frac{1}{RT_S} - \rho_s d_{V_S}^P \Delta \eta \right\}. \tag{C.7}$$

$$b_P^{p'} = -\left[\frac{\mathcal{M}_P^* - \mathcal{M}_P^\circ}{\Delta t} + \frac{\mathcal{M}_e^* - \mathcal{M}_w^*}{\Delta \xi} + \frac{\mathcal{M}_n^* - \mathcal{M}_s^*}{\Delta \eta}\right] - \left[\frac{\mathcal{M}_e' - \mathcal{M}_w'}{\Delta \xi} + \frac{\mathcal{M}_n' - \mathcal{M}_s'}{\Delta \eta}\right].$$
(C.8)

APÊNDICE D – COEFICIENTES E TERMOS FONTE PARA OS VOLUMES FICTÍCIOS

Os coeficientes e termos fonte para os volumes fictícios são determinados pela aplicação das condições de contorno a estes elementos. Transcrito conforme Germer (2014).

- Contorno sul:
 - Conservação da massa:

$$\frac{\partial p}{\partial r} = 0 \rightarrow p'_p = p'_N \tag{D.1}$$

$$a_P^p = 1, \quad a_n^p = -1, \quad a_e^p = a_w^{P'} = a_s^p = b_p^p = 0,$$
 (D.2)

- Quantidade de movimento na direção x:

$$\frac{\partial u}{\partial r} = 0 \rightarrow u_p = u_N \tag{D.3}$$

$$a_P^u = 1, \quad a_n^u = -1, \quad a_e^u = a_w^u = a_s^u = b_p^u = 0,$$
 (D.4)

- Quantidade de movimento na direção radial r:

$$v = 0 \tag{D.5}$$

$$a_P^v = 1, \quad a_n^u = a_e^v = a_w^v = a_s^v = b_p^v = 0,$$
 (D.6)

- Conservação da energia:

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \to T_p = T_N \tag{D.7}$$

$$a_T^u = 1, \quad a_n^T = -1, \quad a_e^T = a_w^T = a_s^T = b_p^T = 0,$$
 (D.8)

- Contorno oeste:
 - Conservação da massa:

$$\frac{P_P + P_E}{2} = P_{in} \tag{D.9}$$

$$a_P^p = a_e^p = 1, \quad a_w^p = a_s^p = a_n^p = 0, \quad b_p^T = 2P'_{in},$$
 (D.10)

- Conservação da quantidade de movimento na direção x:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0 \rightarrow \frac{u_p - u_E}{2z_E} = \frac{u_E - u_{EE}}{z_{EE} - z_E}$$
 (D.11)

$$a_P^u = 1$$
, $a_e^u = -1$, $a_w^u = a_n^u = a_s^u = 0$, $b_p^u = \frac{2x_E}{x_{EE} - x_E} (u_E - u_{EE})$, (D.12)

- Conservação da quantidade de movimento na direção y:

$$v = 0 \tag{D.13}$$

$$a_P^v = 1, \quad a_e^v = a_w^v = a_n^v = a_s^v = b_p^v = 0,$$
 (D.14)

- Conservação da energia:

$$\frac{T_P + T_E}{2} = T_{in} \tag{D.15}$$

$$a_P^T = a_e^T = 1, \quad a_w^T = a_s^T = a_n^T = 0, \quad b_p^T = 2T_{in}.$$
 (D.16)

- Contorno norte:
 - Conservação da massa:

$$\frac{\partial p}{\partial \vec{n}} = 0 \rightarrow p'_p = p'_N \tag{D.17}$$

$$a_P^p = 1, \quad a_n^p = -1, \quad a_w^p = a_e^p = a_s^p = b_p^p = 0,$$
 (D.18)

- Conservação da quantidade de movimento na direção x:

$$\frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = 0 \to u_p = u_S \tag{D.19}$$

$$a_P^u = a_s^u = 1$$
, $a_e^u = a_n^u = a_w^u = 0$, $b_p^u = 2\lambda_P^u(z_\xi)_s \sqrt{\frac{u_s^2 + v_s^2}{(z_\xi)_s^2 + (r_\xi)_s^2}}$, (D.20)

onde

$$\lambda_P^u = \begin{cases} 1, \text{ se } u_S z_{\xi} + v_S r_{\xi} \ge 0, \\ -1, \text{ se } u_S z_{\xi} + v_S r_{\xi} < 0. \end{cases}$$
 (D.21)

- Conservação da quantidade de movimento na direção y:

$$\frac{\partial v}{\partial \vec{n}} = 0 \rightarrow u_p = u_S \tag{D.22}$$

$$a_P^v = a_s^v = 1, \quad a_e^v = a_n^v = a_w^v = 0, \quad b_p^v = 2\lambda_P^v(z_\xi)_s \sqrt{\frac{u_s^2 + v_s^2}{(z_\xi)_s^2 + (r_\xi)_s^2}}$$
 (D.23)

- Conservação da energia:

$$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0 \rightarrow T_p = T_S \tag{D.24}$$

$$a_P^T = 1$$
, $a_s^T = -1$, $a_e^T = a_n^T = a_w^T = 0$, $b_p^v = \beta_s / \gamma_s (T_E + T_{SE} - T_W - T_{SW})$ (D.25)

• Contorno leste:

Para o leste, todas as propriedades têm as mesmas condições de contorno:

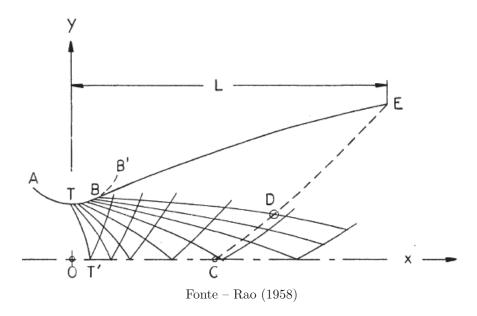
$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0 \to \frac{\phi_P - \phi_W}{2(z_w - z_W)} = \frac{\phi_W - \phi_{WW}}{2(z_W - z_{WW})}$$
(D.26)

$$a_P^{\Phi} = 1$$
, $a_w^{\Phi} = -1$, $a_e^{\Phi} = a_n^{\Phi} = a_w^{\Phi} = 0$, $b_p^{\Phi} = \frac{2(x_w - x_W)}{x_W - x_{WW}} (\Phi_W - \Phi_{WW})$. (D.27)

APÊNDICE E – MÉTODO DE RAO PARA OBTER CONTORNO DE TUBEIRA PARA EMPUXO MÁXIMO

Considere o problema de se obter o contorno da região divergente para empuxo máximo, conforme mostra a Fig. 61. Em resumo, a principal idéia do método de Rao é introduzir uma linha característica como superfície de controle (CE). Aplicando a equação da conservação da massa e de momento linear nessa superfície, as equações diferenciais parciais governantes se reduzem a um problema variacional unidimensional.

Figura 61 – Esquema para a construção da tubeira de Rao.



Considere que o contorno AT é dado. Tal contorno pode ser utilizado para a obtenção da linha de Mach constante TT', maior que 1, utilizando o método de Kliegel e Levine (1969), por exemplo. O raio da expansão circular TB' também é dado. A determinação do ponto B também é solucionado no problema posteriormente. O esquema para construção da tubeira de Rao pelo programa computacional MoCA, pode ser descrito da seguinte maneira:

- 1. Gera-se características à direita a partir da expansão TB';
- 2. Com base no número de mach na saída fornecido, determina-se o ângulo θ_E do vetor de velocidade, e consequentemente, da parede no ponto E através da E.1, dada em termos adimensionais por:

$$sen(2\theta_E) = \frac{2}{\gamma} \left(1 - \frac{p_a}{p_0 p_r(M_E)} \right) \frac{\sqrt{M_E^2 - 1}}{M_E^2}$$
 (E.1)

onde γ é a razão de calores específicos e $p_r(M)$ é a razão entre a pressão local p e a pressão de estagnação p_0 :

$$p_r(M) = \frac{p}{p_0} = \left(1 + \frac{\gamma + 1}{2}M^2\right)^{\gamma/(\gamma - 1)}.$$
 (E.2)

O ângulo de Mach, α , é tal que:

$$\operatorname{sen}(\alpha) = \frac{1}{M},\tag{E.3}$$

$$\operatorname{sen}^{2}(\alpha) + \cos^{2}(\alpha) = 1, \tag{E.4}$$

$$\cos(\alpha) = \frac{\sqrt{M^2 - 1}}{M},\tag{E.5}$$

$$\tan(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{M^2 - 1}},\tag{E.6}$$

$$\cot(\alpha) = \sqrt{M^2 - 1},\tag{E.7}$$

sendo todos positivos pois $0 < \alpha < 90$.

3. As características à direita que emanam de TB' interceptam a superfície de controle (linha tracejada na Fig. 62 e linha CE na Fig. 61. Este passo consiste primeiramente em determinar as coordenadas $(x_D; y_D)$ do ponto D e as coordenadas $(x_E; y_E)$ do ponto E da superfície de controle e, por

fim, toda a linha DE. O procedimento é iterativo:

(a) Escolhe-se uma característica à direita da seção TB', ou seja, de B_1 a D_1 . Determinam-se as coordenadas $(x_{D1}; y_{D1})$ para as quais a Eq. (17) do artigo de Rao (1958) é satisfeita:

$$M^* \frac{\cos(\theta - \alpha)}{\cos \alpha} = M_E^* \frac{\cos(\theta_E - \alpha_E)}{\cos \alpha_E},$$
 (E.8)

onde

$$M^* = \left[\frac{1}{\gamma - 1 + \frac{2}{M^2}}\right]^{1/2},\tag{E.9}$$

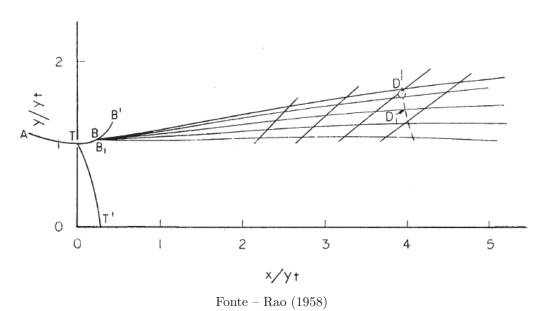


Figura 62 – Determinação dos pontos B e D.

(b) Com as coordenadas de $(x_{D1}; y_{D1})$, determina-se y_E através da Eq. (18) do artigo de Rao (1958):

$$\eta = \frac{y}{y_E} = \frac{g(M_E, \theta_E)}{g(M, \theta)},\tag{E.10}$$

onde

$$g(M,\theta) = \frac{M^2}{\sqrt{M^2 - 1}} p_r(M) \operatorname{sen}^2 \theta, \tag{E.11}$$

(c) Com os valores de $(x_{D1}; y_{D1})$ e y_E , avalia-se se a Eq. (19) do artigo de Rao (1958) é satisfeita:

$$-I_3 + y_E^2 I_1(\eta_{D1}) = 0, (E.12)$$

onde

$$I_3 = \int_{x_{B1}}^{x_{D1}} \frac{\rho_r \sqrt{T_r}}{\cos(\theta - \alpha)} y dx, \tag{E.13}$$

com a integral ao longo da característica B_1D_1 , e

$$I_1(\eta) = \int_{\eta}^{1} \frac{\rho_r \sqrt{T_r}}{\operatorname{sen}(\theta + \alpha)} \eta' d\eta', \tag{E.14}$$

com a integral ao longo da superfície de controle, onde ρ_r é a razão entre a massa específica local ρ e a massa específica de estagnação ρ_0 :

$$\rho_r(M) = \frac{\rho}{\rho_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2}M^2\right)^{-1/(\gamma - 1)},\tag{E.15}$$

 T_r é a razão entre a temperatura local T e a temperatura de estagnação T_0 :

$$T_r(M) = \frac{T}{T_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2}M^2\right)^{-1},$$
 (E.16)

Para calcular a integral da Eq. E.14, $M(\eta)$, e $\theta(\eta)$ são obtidos invertendo-se as equações E.10 e E.8, e α é obtido da Eq. E.3.

- (d) Caso os valores de x_{D1}, y_{D1} e y_E não satisfaçam a Eq. E.13, repetir as etapas (a)-(c) para a outra característica à direita. Se necessário, interpolar as características. Ao final do processo, serão determinadas as coordenadas (x_B, y_B) , (x_D, y_D) e y_E .
- (e) Para determinar as coordenadas x ao longo da superfície de controle DE, basta lembrar que esta superfície é uma característica à esquerda e, portanto deve satisfazer

$$\frac{dx}{dy} = \cot(\theta + \alpha),\tag{E.17}$$

ou

$$x = x_D + \int_{y_D}^{y} \cot(\theta + \alpha) dy', \quad y_D \le y \le y_E$$
 (E.18)

ou ainda

$$x = x_E - y_E I_2(\eta), \quad \eta_D = y_D / y_E \le \eta \le 1,$$
 (E.19)

onde

$$x_E = x_D + y_E I_2(\eta_D), \quad \eta_D = y_D/y_E,$$
 (E.20)

е

$$I_2(\eta) = \int_{\eta}^{1} \cot(\theta + \alpha) d\eta', \quad \eta_D \le \eta \le 1.$$
 (E.21)

Para calcular a integral da Eq. E.21, $M(\eta)$ e $\theta(\eta)$ são obtidos invertendo-se as Eqs. E.10 e E.8 e α é obtido da Eq. Eq39.

4. Conhecidas as características à direita BD e à esquerda DE, resta constrir a rede de características que permitirá determinar o contorno da tubeira conforme Fig. 63.

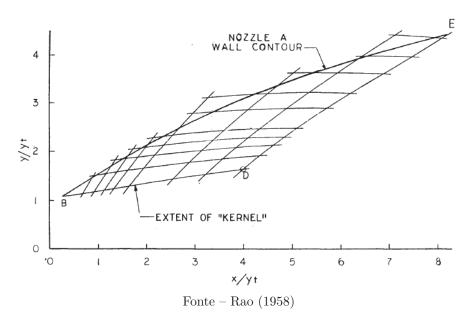


Figura 63 – Esquema para a construção da rede de características.

5. O contorno da tubeira é obtido através da linha de corrente entre o ponto B e o ponto E (Fig. 63). A linha de corrente que satisfaz esta condição é dada por:

$$\frac{dy}{dx} = \tan \theta,\tag{E.22}$$

6. O coeficiente de empuxo C_T é obtido integrando-se a distribuição de pressão e o fluxo de momento linear axial ao longo de T'TE:

$$C_T = \int_0^{y_E} 2p_r \left[1 + \gamma M^2 \operatorname{sen}\theta \cos\theta \left(\cot\theta - \frac{dx}{dy} \right) \right] y dy - \frac{p_a}{p_0} y_E^2, \tag{E.23}$$

Como ao longo de TE não há fluxo $(dx/dy - \cot \theta)$, a integral da Eq. E.23 é reescrita como:

$$\int_{0}^{y_{E}} 2p_{r} \left[1 + \gamma M^{2} \operatorname{sen}\theta \cos\theta \left(\cot\theta - \frac{dx}{dy} \right) \right] y dy + \int_{1}^{y_{E}} 2p_{r} y dy - \frac{p_{a}}{p_{0}} y_{E}^{2}.$$
(E.24)

A primeira integral da Eq. E.24 representa a contribuição da pressão e do fluxo de momento linear para C_T na seção TT' e, portanto não depende do perfil do divergente da tubeira. Numa primeira aproximação (desprezando-se θ e dx/dy), tem-se

$$\int_0^{y_E} 2p_r \left[1 + \gamma M^2 \operatorname{sen}\theta \cos\theta \left(\cot\theta - \frac{dx}{dy} \right) \right] y dy \sim p_r(M) \left[1 + \gamma M^2 \right], \quad (E.25)$$

onde M é o número de Mach constante ao longo da seção TT^{\prime} .

APÊNDICE F – LEITURAS DO GRÁFICO DE (BACK et~al.,~1965)

Tabela 52 – Coordenadas na direção axial (em polegadas) obtidas do gráfico do artigo de Back $et\ al.\ (1965)$

Pontos:	L1	L2	L3	L4	L5	L6	L7	L8	L9	L10
1	0,8043	0,8018	0,8069	0,8069	0,8145	0,7993	0,8069	0,8069	0,8094	0,7993
2	1,0182	1,0207	1,0233	1,0156	1,0182	1,0207	1,0131	1,0232	1,0284	1,0182
3	1,1912	1,1887	1,1963	1,1963	1,1861	1,1912	1,1912	1,1811	1,1887	1,1912
4	1,3929	1,3928	1,3928	1,3944	1,3924	1,3944	1,3985	1,3944	1,3954	1,3954
5	1,7539	1,7556	1,7505	1,7506	1,7516	1,7526	1,7547	1,7537	1,7567	1,7506
6	1,9291	1,9308	1,9292	1,9285	1,9306	1,9316	1,9326	1,9357	1,9295	1,9305
7	2,0894	2,0906	2,0906	2,0888	2,0899	2,0899	2,0899	2,0888	2,0919	2,0909
8	2,1888	$2,\!2502$	2,2185	2,2157	2,2344	2,1914	2,2306	2,2085	$2,\!2256$	2,2072
9	2,4518	2,4601	2,4004	2,5085	2,4531	2,4558	2,4749	2,4282	2,4545	2,4414
10	2.4687	2,4623	2.4042	2,5254	2,4306	2.5007	2,5019	2.4318	2,4684	2.4671
11	2,5925	2,6161	2,6047	2,6018	2,6191	2,6099	2,6161	2,6171	2,5895	2,5935
12	2,6198	2,6478	2,6355	2,6356	2,6173	2,6550	2,6320	2,6270	2,6112	2,6089
13	2,8153	2,8125	2,8142	2,8126	2,8178	2,8147	2,8157	2,8116	2,8136	2,8116
14	3,1143	3,1070	3,1139	3,1135	3,1134	3,1124	3,1124	3,1145	3,1114	3,1104
15	3,6220	3,6241	3,6241	3,6193	3,6244	3,6255	3,6265	3,6255	3,6255	3,6234
16	3,9650	3,9592	3,9677	3,9649	3,9649	3,9628	3,9649	3,9638	3,9628	3,9639
17	4,6071	4,6146	4,6129	4,6185	4,6103	4,6124	4,6113	4,6144	4,6103	4,6123
18	5,2833	$5,\!2856$	5,2838	5,2897	5,2857	5,2877	5,2857	5,2898	5,2877	5,2846
19	5,9805	5,9953	5,9909	5,9850	5,9864	5,9953	5,9835	5,9820	5,9879	5,9938
20	6,6554	6,6642	6,6701	6,6701	6,6687	6,6642	6,6598	6,6598	6,6672	6,6657

Tabela 53 – Pressões (adimensionalizadas pela pressão de estagnação 250,2 psia) obtidas do gráfico do artigo de Back *et al.* (1965)

Pontos	L1	L2	L3	L4	L5	L6	L7	L8	L9	L10
1	0,9986	0,9993	0,9986	1,0006	0,9986	1,0006	0,9993	1,0012	0,9993	0,9986
2	1,0005	0,9986	1,0005	1.0005	0,9993	0,9986	0,9980	0,9973	0,9999	1,0012
3	0,9967	0,9980	0,9986	0,9960	0,9960	0,9967	0,9980	0,9980	0,9986	0,9954
4	0,9969	0,9962	0,9953	0,9958	0,9965	0,9958	0,9955	0,9955	0,9952	0,9958
5	0,9910	0,9897	0,9901	0,9911	0,9903	0,9895	0,9898	0,9906	0,9900	0,9900
6	0,9756	0,9746	0,9750	0,9753	0.9750	0,9737	0,9747	0,9760	0,9750	0,9742
7	0,9521	0,9504	0,9491	0,9488	0,9499	0,9499	0,9499	0,9488	0,9483	0,9499
8	0,8574	0,8583	0,8698	0,8471	0,8630	0,8639	0,8580	0,8586	0,8518	0,8524
9	0,5476	0,5173	$0,\!5306$	0,5310	0,5406	$0,\!5262$	0,5317	0,5321	0,5321	$0,\!5365$
10	0,5033	$0,\!4716$	0,4871	$0,\!4875$	0,4956	0,4956	0,4794	0,4790	0,4871	$0,\!4952$
11	0,2385	0,2450	0,2349	0,2422	0,2362	0,2391	0,2398	0,2419	0,2409	$0,\!2354$
12	0,2190	0,2190	0,2138	$0,\!2166$	0,2138	0,2150	$0,\!2206$	0,2157	0,2166	0,2190
13	$0,\!1957$	$0,\!1961$	0,1957	$0,\!1958$	$0,\!1963$	$0,\!1955$	0,1950	0,1963	0,1955	$0,\!1981$
14	0,1849	0,1840	0,1844	0.1862	0,1841	$0,\!1854$	0,1851	0,1851	0,1849	$0,\!1849$
15	0,1274	$0,\!1271$	0,1275	$0,\!1276$	$0,\!1279$	0,1274	0,1274	0,1289	$0,\!1268$	$0,\!1274$
16	0,0957	0,0951	0,0951	0,0973	0,0973	0,0978	0,0968	0,0968	0,0978	0,0970
17	0,0598	0,0606	0,0576	0,0595	0,0615	0,0610	0,0584	0,0610	0,0587	0,0587
18	0,0367	0,0377	0,0368	0,0356	0,0377	0,0374	0,0382	0,0379	0,0379	0,0356
19	0,0227	0,0224	0,0235	0,0235	0,0220	0,0213	0,0235	0,0213	0,0227	0,0227
20	0,0149	0,0145	0,0145	0,0160	0,0164	0,0164	0,0164	0,0168	0,0168	0,0168

APÊNDICE G – RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES COM A TUBEIRA DE BMG45-15 (BACK et al., 1965)

A seguir são mostrados os campos de velocidades u e v, número de Mach, massa específica ρ , temperatura T e pressão p. As simulações foram realizadas na malha m6.

Figura 64 – Campo de velocidade u(m/s).

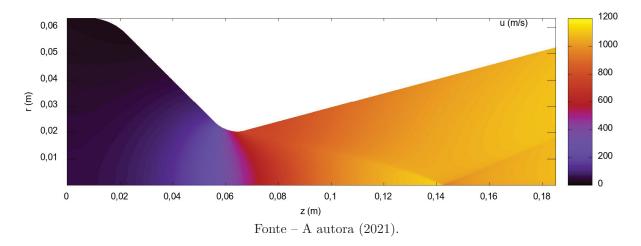
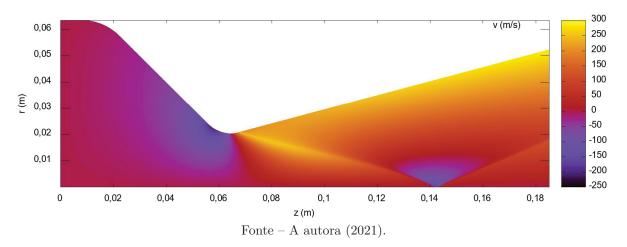


Figura 65 – Campo de velocidade v(m/s).



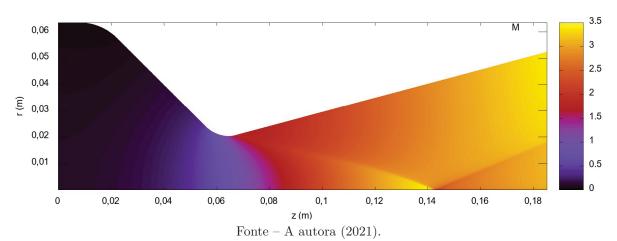


Figura 66 – Campo do número de Mach.

Figura 67 – Campo da massa específica (kg/m^3) .

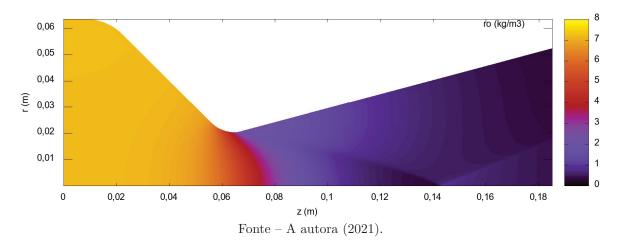
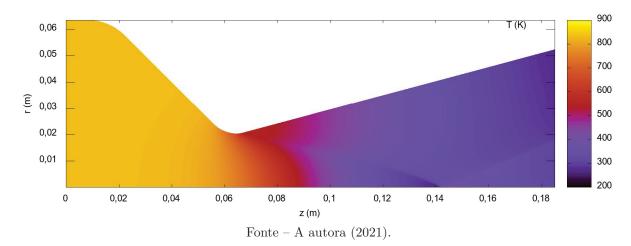
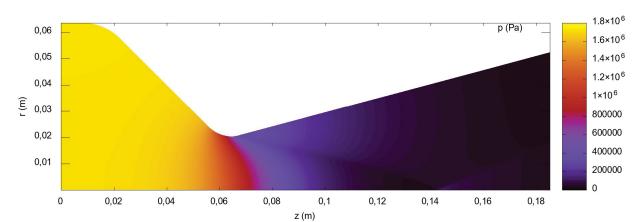


Figura 68 – Campo de temperatura (K).





Fonte – A autora (2021).

Figura 69 – Campo de pressão (Pa).

APÊNDICE H – EQUAÇÕES DE TRANSPORTE. FONTE: (WHITE, 2002)

As equações de transporte podem ser representadas genericamente na forma diferencial:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot \left(\rho \vec{V}\phi\right) = \nabla \cdot J + f,\tag{H.1}$$

onde ϕ é a grandeza a ser transportada, pode ser de natureza escalar ou vetorial; ∇ é o operador diferencial nabla, que representa o divergente; ρ é a massa específica, as variáveis $Je\ f$ estão relacionadas a fluxos difusivos e fontes/sumidouros relativos ao transporte de ϕ .

Na forma como está escrita, a Eq. H.1 é conhecida como forma conservativa. Aplicando-se a distributiva nos termos de transporte de ϕ tem-se a forma não conservativa:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \phi \nabla \cdot (\rho \vec{V}) + (\rho \vec{V} \nabla \phi) = \nabla \cdot J + f, \tag{H.2}$$

entretanto, o segundo e o terceiro termo do lado esquerdo da Eq. H.2 totalizam zero pois constituem a equação da conservação da massa, Eq. H.5. Então, a forma não conservativa da Eq. 3.50 fica:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\rho \vec{V} \cdot \nabla \phi) = \nabla \cdot J + f, \tag{H.3}$$

ou de forma mais compacta, utilizando derivada substantiva ou total:

$$\rho \frac{D\phi}{Dt} = \nabla \cdot J + f. \tag{H.4}$$

Comumente, a forma conservativa é utilizada com volumes finitos e a forma não-conservativa com diferenças finitas. A forma conservativa também está diretamente associada ao conceito Euleriano de escoamento, que expressa a variação de fluxo dentro do V.C. A tabela mostrada na Fig 70 mostra os valores de ϕ , J e f para as equações da massa, da quantidade de movimento, vorticidade, energia térmica, energia cinética e entropia.

Variável	Ψ	J	f
Massa	1	0	0
Quantidade Movimento	$\vec{\boldsymbol{V}}$	Т	$\rho \vec{g} + \rho \vec{a}_{\parallel}$
Vorticidade	$\vec{\omega}$	$\mu\nabla\vec{\omega}$	$\vec{\omega}\!\cdot\! ablaec{V}$
Energia Cinética	k	$\textbf{T}\cdot\vec{V}$	$\boldsymbol{T}\cdot\nabla\vec{V}+\rho\vec{V}\cdot\vec{g}$
Energia Interna	û	$\vec{\textbf{q}}_k$	$\mathbf{T} \cdot \nabla \vec{\mathbf{V}} + \mathbf{q}^{""}$
Entropia	s	$\frac{\vec{q}_k}{\theta}$	$\frac{\rho \textbf{q}^{""}}{\theta} + \frac{\textbf{k}}{\theta^2} \big(\nabla \theta\big)^2 + \frac{\textbf{T} \cdot \nabla \vec{V} - P \nabla \cdot \vec{V}}{\theta}$

Figura 70 – Definições das variáveis ϕ , J e f para as equações da massa, da quantidade de movimento, vorticidade, energia térmica, energia cinética e entropia.

Fonte - (WHITE, 2002)

Na Fig 70, **T** é o tensor das tensões no fluido, u e s a energia interna e entropia específica do fluido; Θ é a temperatura, q_k é o fluxo de calor por unidade de área e q''' fonte ou sorvedouro de calor por unidade de volume.

• Equação da conservação da massa:

De acordo com a Fig. 70, a equação da conservação da massa resulta:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{V} = 0. \tag{H.5}$$

Considerando que a Eq. H.5 é uma equação diferencial parcial de primeira ordem cuja forma para um sistema cartesiano bidimensional (x,y) e em regime permanente resulta:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0. \tag{H.6}$$

Em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho v)}{\partial r} = 0. \tag{H.7}$$

• Equação do transporte da Quantidade de Movimento:

Da Fig. 70, a equação da quantidade de movimento linear resulta em :

$$\frac{\partial(\rho\vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V}\vec{V}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \cdot \vec{g} - \rho \cdot \vec{a_I}. \tag{H.8}$$

O lado esquerdo da Eq. H.8 representa a taxa de variação da quantidade de movimento que cruza a S.C. por unidade de volume. O lado direito representa o somatório das forças externas, por unidade de volume, atuantes no V.C., neste caso representadas pelo tensor de tensões do fluido \mathbf{T} (devido ao campo hidrostático) e às deformações do fluido, pela força de campo gravitacional, g e também por uma aceleração inercial a_I , caso o referencial das velocidades não seja inercial. Forças de campo de natureza elétrica, eletro-magnética, centrífuga, por exemplo, poderiam ser representadas na forma genérica por meio de uma função potencial e adicionadas linearmente no lado direito das equações.

O tensor de tensões \mathbf{T} representa as forças externas que agem na S.C. É necessário estabelecer uma dependência entre o tensor de tensões no fluido, \mathbf{T} , e o tensor de deformações, \mathbf{S} , correspondente ao campo de velocidades. A equação que estabelece a dependência entre \mathbf{T} e \mathbf{S} é denominada por equação constitutiva do fluido. A equação constitutiva que estabelece uma relação linear entre \mathbf{T} , \mathbf{Q} e \mathbf{S} , conhecida como equação constitutiva para um fluido Newtoniano:

$$\mathbf{T} = -\mathbf{P} + \lambda \mathbf{Q} + 2\mu \mathbf{S} \tag{H.9}$$

onde μ e λ são coeficientes de proporcionalidade. Pela hipótese de Stokes, $\lambda = -2/3\mu$. **T**, **Q** e **S** são respectivamente os tensores da pressão hidrostática, divergência de volume e a parte simétrica do tensor de deformação do fluido.

Pode-se mostrar tensor **T** é formado por duas parcelas, uma devido à pressão termodinâmica e outra parcela devido ao movimento do fluido. A parcela devido à pressão termodinâmica corresponde ao primeiro termo depois da igualdade. A parcela devido ao movimento do fluido corresponde ao segundo e terceiro termos após a igualdade. O tensor de tensões **T** é representado de forma mais compacta em notação indicial cartesiana:

$$\mathbf{T}_{ij} = -\mathbf{P} \cdot \delta_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_K}{\partial x_K} \cdot \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$
(H.10)

onde P é o tensor de pressão hidrostática e δ_{ij} é o delta de Kronecker.

A Eq. H.8 pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(\rho\vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V}\vec{V}) = -\nabla \mathbf{P} - \frac{2}{3}\nabla(\mu\nabla \cdot \vec{V}) + \nabla \cdot (2\mu\mathbf{S}) + \rho\vec{g} - \rho \cdot \vec{a_I}, \quad (H.11)$$

que corresponde à forma mais geral da Equação de Navier-Stokes. Esta equação se aplica para escoamentos com propriedades físicas variáveis, isto é, μ e k podem variar em todo o campo do escoamento.

Como hipóteses do presente trabalho tem-se que o referencial é inercial e forças de campo são nulas, portanto a_I e g são iguais a zero.

Pela hipótese de escoamento invíscido, tem-se que μ é igual a zero, fazendo com que o tensor de tensões resulte apenas na primeira parcela do lado direito da Eq. H.10 (parcela da pressão termodinâmica). Considera-se também regime permanente. Portanto após as simplificações, a equação da conservação da quantidade de movimento se torna:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = -\nabla P. \tag{H.12}$$

A equação de Euler para escoamento compressível em coordenadas cartesianas (bidimensional) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vu)}{\partial u} = -\frac{\partial P}{\partial x},\tag{H.13}$$

$$\frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y}.$$
 (H.14)

Em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial(\rho uu)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho uv)}{\partial r} = -\frac{\partial P}{\partial z}.$$
 (H.15)

$$\frac{\partial(\rho uv)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho vv)}{\partial r} = -\frac{\partial P}{\partial r}.$$
 (H.16)

• Equação de transporte da Energia Térmica:

A equação de transporte de energia térmica é obtida a partir da primeira lei da termodinâmica, que estabelece que a variação de energia para um sistema é igual a soma dos fluxos de calor e trabalho que cruzam a fronteira do sistema. Deve-se então aplicar o teorema da divergência para chegar à forma diferencial da equação

da energia (BIRD, 2002). A equação da energia na forma conservativa em termos da temperatura Θ e do calor específico a pressão constante c_P é dada por:

$$c_P \left(\frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \theta \vec{V}) \right) = \nabla \cdot (k \nabla \Theta) - \beta \Theta \frac{Dp}{Dt} + \Phi + q''', \tag{H.17}$$

onde β é o coeficiente de compressibilidade isobárica, q''' é a fonte ou sumidouro de calor (W/m^3) , Φ é o termo de dissipação viscosa e k é a condutividade do fluido. Com a hipótese de fluido como gás ideal tem-se que β é igual a $1/\Theta$. Com a hipótese de escoamento invíscido, o termo Φ se anula. Considera-se que não existe fonte ou sumidouro de energia, portanto q''' é igual a zero. A Eq. H.17 se torna:

$$c_P \left(\frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \Theta \vec{V}) \right) = \nabla \cdot (k \nabla \Theta) + \frac{Dp}{Dt}.$$
 (H.18)

Considere também que a derivada material $\frac{Dp}{Dt}$ é dada por:

$$\frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla p. \tag{H.19}$$

Com estas simplificações:

$$c_p \left(\frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \Theta \vec{V}) \right) = \nabla \cdot (k \nabla \Theta) + \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla p.$$
 (H.20)

Desprezando o primeiro termo do lado direito da igualdade referente à condução de calor e considerando regime permanente:

$$c_p\left(\nabla \cdot (\rho \Theta \vec{V})\right) = \vec{V} \cdot \nabla p.$$
 (H.21)

Em coordenadas cartesianas, bidimensional:

$$c_p \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u \Theta \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho v \Theta \right) \right] = u \frac{\partial p}{\partial x} + v \frac{\partial p}{\partial x}, \tag{H.22}$$

Em coordenadas cilíndricas, bidimensional:

$$c_p \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\rho u \Theta \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho v \Theta \right) \right] = u \frac{\partial p}{\partial z} + v \frac{\partial p}{\partial r}, \tag{H.23}$$

APÊNDICE I – OTIMIZAÇÕES NO CONVERGENTE - RESULTADOS COM MER E 8 VARIÁVEIS

Figura 71 – Campo de velocidade u(m/s) para o perfil otimizado com 8 variáveis e utilização de MER.

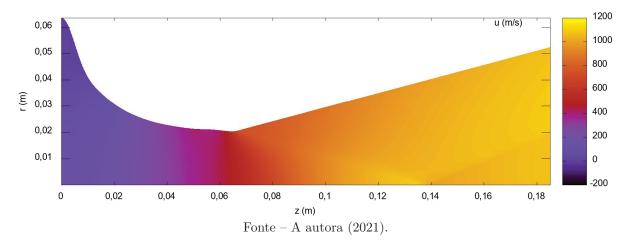


Figura 72 – Campo de velocidade v(m/s) para o perfil otimizado com 8 variáveis e utilização de MER.

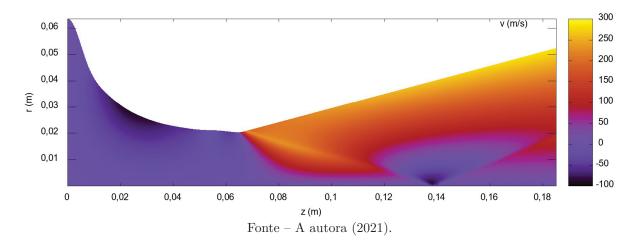


Figura 73 — Campo de pressão p(Pa) para o perfil otimizado com 8 variáveis e utilização de MER.

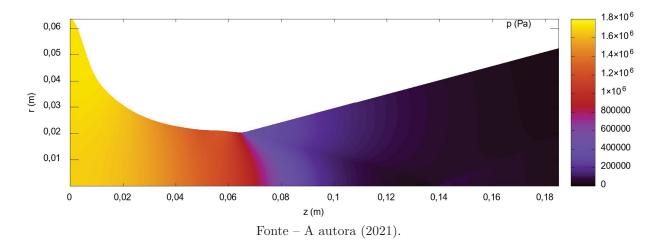


Figura 74 — Campo do número de Mach para o perfil otimizado com 8 variáveis e utilização de MER.

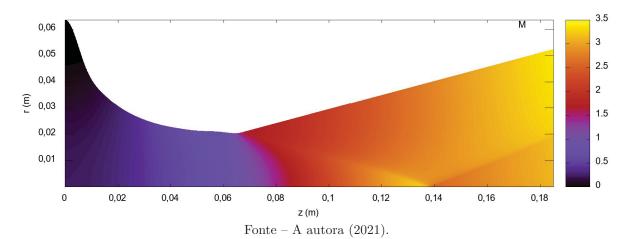


Figura 75 – Campo da massa específica (kg/m^3) para o perfil otimizado com 8 variáveis e utilização de MER.

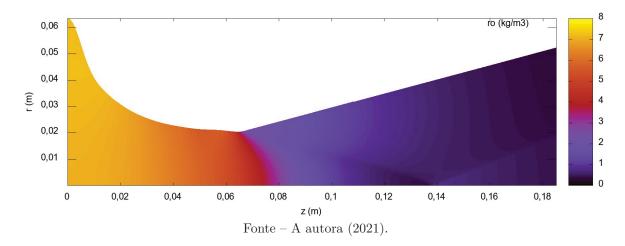
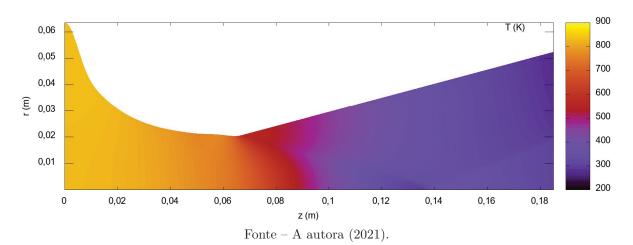


Figura 76 – Campo de temperaturas T(K) para o perfil otimizado com 8 variáveis e utilização de MER.





ANEXO A – PROPRIEDADES FÍSICAS DO AR

T[K]	$cp \ [J/(kg.K)]$	$\mu [Pa.s]$	k [W/(m.K)]
100	1032	$0,711 \cdot 10^{-5}$	0,00934
150	1012	$1,034 \cdot 10^{-5}$	0,01380
200	1007	$1,325 \cdot 10^{-5}$	0,01810
250	1006	$1,596 \cdot 10^{-5}$	0,02230
300	1007	$1,846 \cdot 10^{-5}$	0,02630
350	1009	$2,082 \cdot 10^{-5}$	0,03000
400	1014	$2,301 \cdot 10^{-5}$	0,03380
450	1021	$2,507 \cdot 10^{-5}$	0,03730
500	1030	$2,701 \cdot 10^{-5}$	0,04070
550	1040	$2,884 \cdot 10^{-5}$	0,04390
600	1051	$3,058 \cdot 10^{-5}$	0,04690
650	1063	$3,225 \cdot 10^{-5}$	0,04970
700	1075	$3,388 \cdot 10^{-5}$	0,05240
750	1087	$3,546 \cdot 10^{-5}$	0,05490
800	1099	$3,698 \cdot 10^{-5}$	0,05730
850	1110	$3,843 \cdot 10^{-5}$	0,05960
900	1121	$3,981 \cdot 10^{-5}$	0,06200
950	1131	$4{,}113 \cdot 10^{-5}$	0,06430
1000	1141	$4,244 \cdot 10^{-5}$	0,06670
1100	1159	$4,490 \cdot 10^{-5}$	0,07150
1200	1175	$4,730 \cdot 10^{-5}$	0,07630
1300	1189	$4,960 \cdot 10^{-5}$	0,08200
1400	1207	$5,300 \cdot 10^{-5}$	0,09100
1500	1230	$5,570 \cdot 10^{-5}$	0,10000
1600	1248	$5,840 \cdot 10^{-5}$	0,10600
1700	1267	$6,110 \cdot 10^{-5}$	0,11300
1800	1286	$6,370 \cdot 10^{-5}$	0,12000
1900	1307	$6,630 \cdot 10^{-5}$	0,12800
2000	1337	$6,890 \cdot 10^{-5}$	$0,\!13700$
2100	1372	$7{,}150 \cdot 10^{-5}$	0,14700
2200	1417	$7,400 \cdot 10^{-5}$	0,1600
2300	1478	$7,660 \cdot 10^{-5}$	$0,\!17500$
2400	1558	$7,920 \cdot 10^{-5}$	0,19600
2500	1665	$8{,}180 \cdot 10^{-5}$	0,22200
3000	2726	$9,550 \cdot 10^{-5}$	0,48600

ANEXO B – GRÁFICO UTILIZADO PARA LEITURA DOS DADOS EXPERIMENTAIS. FONTE: (BACK et al., 1965)

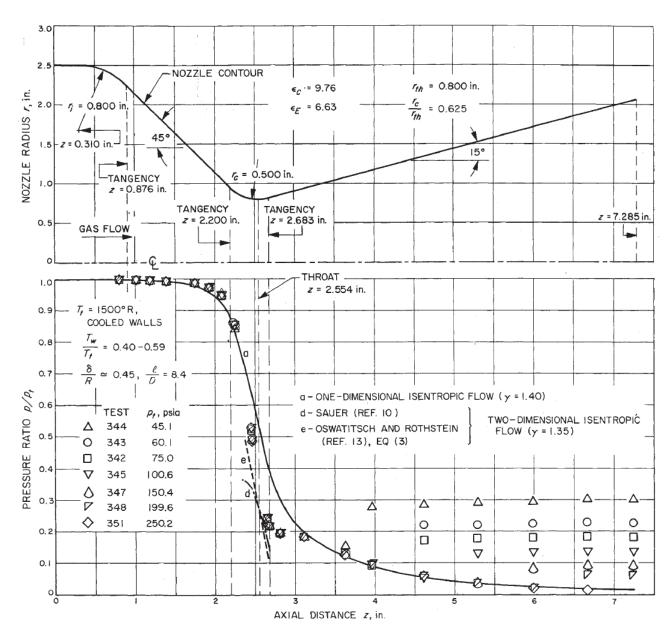


Figura 77 – Gráfico dos dados experimentais da tubeira BMG45-15. Fonte: Figura 3 de Back *et al.* (1965).