Jonas Joacir Radtke

## Otimização da Geometria da Seção Divergente de Tubeiras de Motores-Foguete

Curitiba - PR, Brasil

24 de setembro de 2014

#### Jonas Joacir Radtke

## Otimização da Geometria da Seção Divergente de Tubeiras de Motores-Foguete

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Ciências no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi

CFD, PROPULSÃO E AERODINÂMICA DE FOGUETES MECÂNICA COMPUTACIONAL PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

> Curitiba - PR, Brasil 24 de setembro de 2014

R1310

Radtke, Jonas Joacir Otimização da geometria da seção divergente de tubeiras de motoresfoguete / Jonas Joacir Radtke. – Curitiba, 2014. 119f. : il. color. ; 30 cm.

Tese - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, 2014.

Orientador: Carlos Henrique Marchi . Bibliografia: p. 105-108.

1. Fluidodinâmica computacional. 2. Análise numérica. 3. Veículos espaciais - Sistemas de propulsão. 4. Motores de foguetes. I. Universidade Federal do Paraná. II.Marchi, Carlos Henrique. III. Título.

CDD: 629.134354

#### TERMO DE APROVAÇÃO

#### JONAS JOACIR RADTKE

### OTIMIZAÇÃO DA GEOMETRIA DA SEÇÃO DIVERGENTE DE TUBEIRAS DE MOTORES-FOGUETE.

Tese aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de doutor no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:

Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi

(Orientador) Membro do PPGMNE/UFPR

25/01

Prof. Dr. Carlos Alberto Rocha Pimentel Membro da UFABC – Santo André/SP

Dr. José Nivaldo Hinckel Membro do INPE – São José dos Campos/SP

Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki Membro do PPGMNE/UFPR

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Almeida Membro do PPGMNE/UFPR

Curitiba, 24 de setembro de 2014

# Dedicatória

Dedico este trabalho a minha mãe, que desde muito cedo me incentivou a estudar e que muito empenhou-se para que isto fosse possível.

## Agradecimentos

Primeiramente a Deus.

A minha família, em especial a minha esposa Cristina Begnini e a minha filha Laura Gabriele Radtke pelo companheirismo e apoio ao longo de todo o tempo compartilhado.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi, pela dedicação na orientação e correção deste trabalho, e aos demais professores e colegas do grupo de pesquisa em CFD, Propulsão e Aerodinâmica de Foguetes pelo conhecimento que me foi passado e pelos diversos momentos de discusões proporcionados.

A todos os amigos e colegas, pelo apoio e por proporcionarem momentos de descontração, indispensáveis para o bom andamento deste trabalho. Em especial, ao Guilherme Bertoldo tanto pela amizade como pelas significativas contribuições.

Aos colegas da coordenação de tecnologia da informação da UTFPR, em particular ao Marcelo Riedi e ao Jhonnatan Ricardo Semler, por todo o apoio técnico na instalação e manutenção do cluster, criado para o desenvolvimento deste trabalho.

Gostaria de agradecer a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Agência Espacial Brasileira (AEB) pelo suporte financeiro. E também a Universidade Federal do Paraná (UFPR), através do Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE), pela disponibilidade de espaço físico e equipamentos, bem como, ao CENAPAD-UFC (Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho da Universidade Federal do Ceará) pela disponibilidade de recursos computacionais para o desenvolvimento deste trabalho.

Por último, mas não menos importante, agradeço aos membros da banca, Prof. Dr. Carlos Alberto Rocha Pimentel, Prof. Dr. José Nivaldo Hinckel, Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki e Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Almeida, por todo o tempo dispendido, sugestões e críticas apontadas para melhoria deste trabalho.

### Resumo

Baseado em dinâmica dos fluidos computacional, o presente trabalho investigou a otimização do desempenho de tubeiras de motores-foguete. Para resolver o sistema de equações de conservação de massa, da quantidade de movimento linear e de energia, o código computacional utiliza o Método de Volumes Finitos. Este método é baseado em uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade, arranjo co-localizado de variáveis e aproximações de primeira ordem para os termos advectivos e segunda ordem para os termos difusivos. O método SIMPLEC é utilizado para o acoplamento pressão-velocidade. As estimativas de erro numérico foram calculadas utilizando-se os estimadores de Richardson, GCI e Convergente. A validação do modelo foi obtida através de dados experimentais disponíveis na literatura e resultados de referência foram gerados. O principal objetivo deste trabalho foi a obtenção da geometria da tubeira que maximiza o desempenho do motor-foguete. Foram considerados diferentes modelos matemáticos (Euler e Navier-Stokes) para escoamentos monoespécie e congelado, bem como, diferentes condições de operação (pressão de estagnação e temperatura de estagnação), para avaliar a influência destes modelos e condições de operação sobre a configuração ótima de tubeiras com várias dimensões. Foi desenvolvido um algoritmo de Evolução Diferencial para otimizar a geometria da tubeira. Como resultados, obteve-se a geometria de uma tubeira ótima sob cada uma das condições consideradas, bem como, a avaliação de o quanto e como cada condição afeta as características da tubeira ótima. Mostrou-se que a inclinação ótima de uma tubeira cônica para operação no vácuo é de aproximadamente 25 graus, que possui coeficente de empuxo de até 2,46% superior ao obtido para a tubeira cônica de 15 graus. O ganho no desempenho obtido para tubeiras sino ficou entre 2,2 e 3,7% do desempenho da tubeira cônica de 15 graus. Verificou-se que a tubeira parabólica otimizada possui desempenho muito próximo ao obtido para a tubeira sino otimizada, tal diferença ficou menor do que 0,2% em todos os casos avaliados. Constatou-se que a temperatura do gás e o modelo físico utilizado na simulação numérica são os principais fatores que influenciam a geometria ótima das tubeiras. A geometria obtida pela metodologia proposta, apresentou o mesmo desempenho do que a obtida pelo Método de Rao, além de permitir a utilização de modelos mais realistas na previsão do escoamento.

Palavras-chave: Dinâmica dos Fluidos Computacional. Método de Volumes Finitos. Propulsão. Otimização. Motores-Foguete. Estimativa de Erro Numérico. Verificação. Validação. Benchmarks.

### Abstract

Based on computational fluid dynamics, this study investigated the performance optimization of rocket engine nozzles. To solve the system of equations of mass conservation, linear momentum and energy, the computational code uses the finite volume method. This method is based on a formulation suitable to any scheme of speed, co-located arrangement of variables and first-order approximations for the advection terms and second order for the diffusive terms. The SIMPLEC method is used for the pressure-velocity coupling. The numerical error estimates were calculated by using the estimators Richardson, GCI and Convergent. Model validation was obtained by experimental data available in the literature and reference results were generated. The main object of this work was to obtain the nozzle geometry that maximizes the performance of the rocket engine. Different mathematical models (Euler and Navier-Stokes) for frozen and monospecies flows were considered, as well as different operating conditions (stagnation pressure and stagnation temperature), in evaluating the influence of such models and operating conditions on the optimum configuration nozzles with various dimensions. An algorithm of Differential Evolution was developed to optimize the geometry of the nozzle. As a result, we obtained the optimal geometry of a nozzle under each of the conditions considered, as well the evaluation of how much and how each condition affects the characteristics of the optimal nozzle. Results have shown that the optimal inclination of a conical nozzle for operation in vacuum is approximately 25 degrees, which has thrust coefficient, up to 2.46% higher than for the 15 degree conical nozzle. The gain in performance obtained for bell nozzles were between 2.2 and 3.7% of the performance of the 15 degree conical nozzle. It has been found that the optimized parabolic nozzle performance is very close to that obtained for the optimized nozzle bell; the difference was less than 0.2% in the performance of all cases evaluated. It has also been found that the gas temperature and the physical model used in the numerical simulation are the main factors that influence the optimal geometry of the nozzles. Geometry obtained by the proposed methodology showed the same performance than that obtained by the method of Rao, besides allowing the use of more realistic models in predicting of flow.

Keywords: Computational Fluid Dynamics. Finite Volume Method. Propulsion. Optimization. Rocket engines. Numerical Error Estimation. Verification. Validation. Benchmarks.

# Lista de Figuras

1.1	Tipos de tubeiras: (a) perfil cônico; (b) perfil sino; (c) perfil parabólico	
	[adaptado de Sutton e Biblarz (2000)]	p. 23
3.1	Função de Ackley unidimensional	p. 39
3.2	Função de Rastrigin unidimensional	p. 39
3.3	Curvas de nível da função de Ackley bidimensional	p. 40
3.4	Curvas de nível da função de Rastrigin bidimensional	p. 40
3.5	Desempenho do DEPP na otimização da função de Ackley	p. 41
3.6	Desempenho do DEPP na otimização da função de Rastrigin	p. 42
4.1	Condições de contorno aplicadas ao escoamento no interior da tubeira	p. 46
4.2	Mapeamento do domínio físico ao domínio computacional [adaptado de	
	Maliska (2010)]	p. 50
4.3	Malha $32 \times 16$ com discretização uniforme na direção radial	p. 57
4.4	Malha $64 \times 32$ com discretização uniforme na direção radial	p. 57
4.5	Malha $128 \times 64$ com discretização uniforme na direção radial	p. 58
4.6	Malha $32 \times 20$ com discretização não uniforme na direção radial	p. 58
4.7	Malha 64 × 40 com discretização não uniforme na direção radial	p. 59
4.8	Malha 128 × 80 com discretização não uniforme na direção radial	p. 59
5.1	Perfil da tubeira parabólica utilizada na verificação do código Mach2D	p. 65
5.2	Malha $64 \times 32$ com discretização uniforme nas direções axial e radial	p. 67
5.3	Malha $64 \times 32$ com discretização concentrada próximo a garganta na direção	
	axial e uniforme na direção radial.	p. 67
5.4	Malha 64 $\times$ 40 com discretização concentrada próximo a garganta na direção	
	axial e PG na direção radial.	p. 68

5.5	Malha $64 \times 40$ com discretização concentrada próximo a garganta na direção axial e PG-melhorada na direção radial.	p. 68
5.6	Perfil da tubeira utilizada na validação do Mach2D [Fonte: Back, Massier e Gier (1965)].	p. 78
5.7	Comparação entre os resultados experimentais da pressão na parede e as soluções analítica unidimensional e numérica para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.	p. 82
5.8	Curvas de nível do número de Mach ( <i>M</i> ) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.	p. 82
5.9	Curvas de nível da pressão ( <i>p</i> em <i>Pa</i> ) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.	p. 83
5.10	Curvas de nível da temperatura ( $T \text{ em } K$ ) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes	p. 83
6.1	Perfil da seção convergente utilizada em todas as tubeiras otimizadas	p. 84
6.2	Geometria da tubeira cônica otimizada.	p. 87
6.3	Relação entre o desempenho e a inclinação da parede para alguns casos de tubeiras cônicas	p. 89
6.4	Perfil da tubeira parabólica a ser otimizada.	p. 90
6.5	Posição dos pontos de controle do contorno da tubeira sino [adaptado de Cai et al. (2007)].	p. 93
6.6	Diferença percentual entre o desempenho da tubeira sino otimizada em comparação às tubeiras cônica otimizada, parabólica otimizada, cônica de 15 <sup>0</sup> , cônica com mesma razão de expansão e sino de Anderson Jr. (1990)	p. 98
6.7	Comparação entre as geometrias obtidas nas otimizações do caso C01 com as geometrias de referência.	p. 99
6.8	Relação entre o tempo de processamento total e o número de chamadas do Mach2D para todos os casos avaliados	p. 100
6.9	Geometria da tubeira ajustada aos pontos apresentados por Rao (1958)	p. 100

# Lista de Tabelas

3.1	Pseudocódigo do algoritmo de Evolução Diferencial.	p. 36
4.1	Valores dos coeficientes da equação de conservação transformada geral	p. 52
4.2	Pseudocódigo para discretização na direção axial com concentração de volumes próximo à garganta.	p. 55
4.3	Pseudocódigo para discretização PG-melhorada na direção radial.	p. 56
5.1	Parâmetros físicos e geométricos utilizados na verificação do código Mach2D.	p. 65
5.2	Configurações dos computadores do cluster da UTFPR, câmpus Francisco Beltrão	p. 66
5.3	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes e malha uniforme em ambas as direções [solução analítica: 0,99996927528521751]	p. 69
5.4	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes e malha concentrada na garganta na direção axial [solução analítica: 0,99996927528521751]	p. 70
5.5	Resultados do coeficiente de empuxo $(C_{Fv})$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes e malha concentrada na garganta na direção axial	p. 70
5.6	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes e malha tipo PG na direção radial.	p. 71
5.7	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes e malha tipo PG-melhorada	p. 71
5.8	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis e malha concentrada na garganta	
	na direção axial.	p. 72

5.9	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido congelado e malha com concentração na garganta na direção axial	p. 72
5.10	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.	p. 74
5.11	Resultados do coeficiente de empuxo $(C_{Fv})$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.	p. 74
5.12	Resultados do impulso específico no vácuo $(I_s)$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.	p. 75
5.13	Resultados do empuxo (F) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.	p. 75
5.14	Medidas experimentais do coeficiente de descarga $(C_d)$ [Fonte: Back, Massier e Gier (1965)]	p. 77
5.15	Pressões para cada coordenada com respectivas incertezas relacionadas à extração dos dados experimentais do gráfico do artigo de Back, Massier e Gier (1965).	p. 77
5.16	Parâmetros físicos e geométricos utilizados na validação do Mach2D	p. 79
5.17	Solução numérica do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes	p. 79
5.18	Solução numérica do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis	p. 80
5.19	Solução numérica do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.	p. 80
5.20	Resultados experimentais da pressão na parede $(p_{wall})$ e numéricos para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.	p. 81
6.1	Configurações dos computadores do CENAPAD-UFC	p. 85
6.2	Resumo das características geométricas e físico-químicas consideradas nas otimizações das tubeiras.	p. 86
6.3	Comparação entre o desempenho das tubeiras cônicas otimizadas com o desempenho de tubeiras cônicas de 15 <sup>o</sup>	p. 88
6.4	Resultados das otimizações dos parâmetros das tubeiras parabólicas	p. 91

6.5	Comparação entre o desempenho das tubeiras parabólicas otimizadas com o
	desempenho de tubeiras cônicas de 15 <sup>0</sup> , tubeiras cônicas de mesma razão de
	expansão ( $\varepsilon$ ) e tubeiras com coeficiente de empuxo ideal p. 92
6.6	Resultados da otimização de três parâmetros da tubeira sino p. 94
6.7	Resultados da otimização de quatro parâmetros da tubeira sino p. 95
6.8	Resultados da otimização de cinco parâmetros da tubeira sino p. 95
6.9	Resultados da otimização de seis parâmetros da tubeira sino p. 96
6.10	Comparação entre o desempenho das tubeiras sino otimizadas com o desempenho de tubeiras com coeficiente de empuxo ideal e cônicas de $15^{\circ}$ . p. 97
6.11	Comparação entre o desempenho das tubeiras sino otimizadas com o desempenho de tubeiras cônicas de mesma razão de expansão ( $\varepsilon$ ) e tubeiras de Anderson Jr. (1990)
6.12	Parâmetros físicos e geométricos utilizados na simulação do escoamento para otimização da tubeira do artigo de Rao (1958)
6.13	Resultados da otimização de seis parâmetros da tubeira de Rao (1958) p. 101
A.1	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes obtidos com malhas tipo PG-melhorada para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1
A.2	Resultados do coeficiente de empuxo $(C_{Fv})$ para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes obtidos com malhas tipo PG-melhorada para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1
A.3	Resultados do impulso específico no vácuo $(I_{sp})$ para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes obtidos com malhas tipo PG-melhorada para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1
A.4	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para a os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1

A.5	Resultados do coeficiente de empuxo $(C_{Fv})$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1
A.6	Resultados do impulso específico no vácuo $(I_{sp})$ para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1
A.7	Resultados do coeficiente de descarga $(C_d)$ para o escoamento invíscido congelado obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1 p. 112
A.8	Resultados do coeficiente de empuxo $(C_{Fv})$ para o escoamento invíscido congelado obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1 p. 112
A.9	Resultados do impulso específico no vácuo $(I_{sp})$ para o escoamento invíscido congelado obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1 p. 113
B.1	Coordenadas na direção axial (em polegadas) obtidas do gráfico do artigo de Back, Massier e Gier (1965)
B.2	Pressões (adimensionalizadas pela pressão de estagnação 250,2 <i>psia</i> ) obtidas do gráfico do artigo de Back, Massier e Gier (1965)
A.1	Coeficientes $(\hat{a}_i)$ usados para determinação das propriedades termoquímicas das espécies para temperatura menor do que $1000K$ [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)]
A.2	Coeficientes $(\hat{a}_i)$ usados para determinação das propriedades termoquímicas das espécies para temperatura maior ou igual a $1000K$ [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)]
B.1	Coeficientes $(\hat{a}_i)$ usados para determinação da condutividade térmica $(\kappa)$ das espécies para temperatura menor que $1000 K$ [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)]

B.2	Coeficientes $(\hat{a}_i)$ usados para determinação da condutividade térmica $(\kappa)$ das
	espécies para temperatura maior ou igual a 1000K [Fonte: McBride, Gordon
	e Reno (1993)]
<b>C</b> .1	Coeficientes $(\hat{a}_i)$ usados para determinação da viscosidade $\mu$ das espécies
	para temperatura menor do que 1000K [Fonte: McBride, Gordon e Reno
	(1993)]
C.2	Coeficientes $(\hat{a}_i)$ usados para determinação da viscosidade $\mu$ das espécies
	para temperatura maior ou igual a $1000 K$ [Fonte: McBride, Gordon e Reno
	(1993)]
D.1	Propriedades termofísicas do ar à pressão atmosférica [Fonte: Incropera e
	DeWitt (1998)]

# Lista de Siglas

- CDS Central Differencing Scheme
- **CENAPAD** Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho
- **CFD** Computational Fluid Dynamics
- **DE** Differential Evolution
- **DEPP** Differential Evolution Parallel Program
- ESA European Space Agency
- GCI Grid Convergence Index
- MSI Modified Strongly Implicit
- NASA National Aeronautics and Space Administration
- **RSM** Response surface methodology
- SIMPLEC Semi Implicit Linked Equations Consistent
- SSME Space Shuttle main engine
- **UDS** Upwind Differencing Scheme
- UFC Universidade Federal do Ceará
- UTFPR Universidade Tecnológica Federal do Paraná

# Lista de Símbolos

а	coeficiente genérico das equações de conservação discretizadas
â	coeficientes das propriedades termoquímicas dos gases
$a_1$	largura do volume de controle vizinho a parede da tubeira [m]
Α	área da tubeira transversal ao eixo de simetria $[m^2]$
$b_p$	termo-fonte das equações de conservação discretizadas
$C_d$	coeficiente de descarga [adimensional]
$C_{Fv}$	coeficiente de empuxo no vácuo [adimensional]
$C_{Fvi}$	coeficiente de empuxo no vácuo ideal [adimensional]
$C^{\Phi}$	coeficiente genérico das equações de conservação
$c_p$	calor específico à pressão constante $[J/kg \cdot K]$
d	variável auxiliar para determinar o comprimento do volume da malha na direção radial [ <i>m</i> ]
$d_x$	comprimento do volume da malha na direção axial [m]
D	constante de diferenciação
Ε	erro numérico verdadeiro
F	empuxo [N]
$\bar{F}$	aptidão do indivíduo teste
Ê	vetor com a aptidão da população atual
$F_S$	fator de segurança do estimador GCI
g	número da geração atual
$g_0$	aceleração da gravidade ao nível do mar $[m/s^2]$
h	métrica da malha
i	índice utilizado como contador no comando de repetição
<i>i<sub>best</sub></i>	índice de indivíduo com a melhor aptidão

$I_c$	inclinação da parede da seção convergente da tubeira [°]
$I_d$	inclinação da parede da seção divergente da tubeira [°]
I <sub>exit</sub>	inclinação da parede na saída da tubeira [ <sup>0</sup> ]
$I_s$	impulso específico $[N \cdot s/kg]$
Isp	impulso específico [s]
j	índice utilizado como contador no comando de repetição
J	jacobiano $[m^{-2}]$
$k_p$	índice do volume de referência
<i>k</i> <sub>n</sub>	índice do volume norte do volume de referência
l	índice de indivíduo da população
L	comprimento da tubeira [m]
'n	vazão mássica $[kg/s]$
т	índice de indivíduo da população
М	número de Mach [adimensional]
n	índice do indivíduo da população
ñ	vetor normal unitário
$N_g$	número de gerações
$N_p$	tamanho da população
N <sub>rsm</sub>	número de indivíduos utilizados no RSM
$N_{u}$	número de incógnitas
$n_{\chi}$	número de volumes na direção axial
$n_y$	número de volumes na direção radial
OF	razão de mistura [adimensional]
р	pressão estática [Pa]
Р	matriz com com as características da população
$P_c$	probabilidade de cruzamento
$p_L$	ordem assintótica do erro
$p_U$	ordem aparente do erro
$P^{\Phi}$	termo-fonte genérico das equações de conservação

q	razão de refino da malha [adimensional]
Q	razão da progressão geométrica
r	raio da tubeira [ <i>m</i> ]
r <sub>cin</sub>	raio de curvatura na entrada da tubeira [m]
r <sub>cgc</sub>	raio de curvatura na seção convergente da garganta [m]
r <sub>cgd</sub>	raio de curvatura na seção divergente da garganta [m]
R	constante do gás ou da mistura de gases $[J/kg \cdot K]$
R	constante universal dos gases perfeitos $[J/mol \cdot K]$
Rnd	número aleatório inteiro
$S^{\Phi}$	termo-fonte genérico das equações de conservação
Т	temperatura [K]
t	tempo [s]
t <sub>cpu</sub>	tempo de CPU [ <i>hh</i> : <i>mm</i> : <i>ss</i> ]
$t_q$	tempo de queima [s]
и	velocidade axial $[m/s]$
U	incerteza numérica
$\bar{U}$	componente contravariante da velocidade na direção axial $[m^2/s]$
v	velocidade radial $[m/s]$
$\bar{V}$	componente contravariante da velocidade na direção radial $[m^2/s]$
x	direção axial [m]
X	vetor com as características do indivíduo teste
$x_I$	coordenada de intersecção entre o arco e a curva da parede [m]
X <sub>rsm</sub>	vetor com as características do indivíduo obtido pelo RSM
у	direção radial [m]
Y	fração mássica
w	razão entre o comprimento total da tubeira e a soma dos raios locais da malha

### Letras Gregas

componente do tensor métrico $[m^2]$
coeficiente do perfil parabólico
componente do tensor métrico $[m^2]$
coeficiente do perfil parabólico
razão entre calores específicos [adimensional]
componente do tensor métrico $[m^2]$
coeficiente do perfil parabólico
termo-fonte genérico das equações de conservação
razão de área da tubeira [adimensional]
coordenada radial generalizada [m]
coordenada axial generalizada [m]
condutividade térmica $[W/m \cdot K]$
viscosidade dinâmica $[Pa \cdot s]$
massa específica $[kg/m^3]$
tensão de cisalhamento [Pa]
solução numérica da variável de interesse
solução analítica da variável de interesse
razão de convergência da solução numérica para a solução analítica

#### Subscritos

0	propriedade de estagnação
1	propriedade da malha fina
2	propriedade da malha grossa
3	propriedade da malha super grossa
С	propriedade da região convergente da tubeira
С	estimador Convergente
d	propriedade da região divergente da tubeira
е	propriedade na face direita de <i>P</i> (face leste)

Ε	propriedade no volume à direita de P (volume leste)	
exit	propriedade na saída da tubeira	
g	propriedade na garganta da tubeira	
GCI	estimador GCI	
i	espécie química	
in	propriedade na entrada da tubeira	
j	coordenada de controle	
max	maior valor assumido pela variável	
min	menor valor assumido pela variável	
n	propriedade na face superior de $P$ (face norte)	
Ν	propriedade no volume superior à $P$ (volume norte)	
NE	propriedade no volume superior à direita de $P$ (volume nordeste)	
NW	propriedade no volume superior à esquerda de $P$ (volume noroeste)	
Р	propriedade no volume arbitrário (volume P)	
Ri	estimador Richardson	
S	propriedade na face inferior de $P$ (face sul)	
S	propriedade no volume inferior à $P$ (volume sul)	
SE	propriedade no volume inferior à direita de $P$ (volume sudeste)	
SW	propriedade no volume inferior à esquerda de $P$ (volume sudoeste)	
W	propriedade na face à esquerda de $P$ (face oeste)	
W	propriedade no volume à esquerda de $P$ (volume oeste)	
wall	propriedade na parede da tubeira	
$\infty$	estimativa do valor analítico	

# Sumário

1	Intr	odução	p. 23	
	1.1	Definição do Problema	p. 23	
	1.2	Importância do Problema	p. 25	
	1.3	Objetivos do Trabalho	p. 27	
	1.4	Estrutura do Trabalho	p. 27	
2	Revi	isão Bibliográfica	p. 29	
3	Mét	odo de Otimização	p. 34	
	3.1	O Algoritmo de Evolução Diferencial	p. 34	
	3.2	O Método de Superfície de Resposta	p. 37	
	3.3	O Código Computacional DEPP	p. 37	
	3.4	Validação do DEPP	p. 38	
4	Mod	Modelagem Matemática e Numérica		
	4.1	Modelo Físico	p. 43	
		4.1.1 Escoamento Monoespécie	p. 43	
		4.1.2 Escoamento Congelado	p. 43	
	4.2	Modelo Matemático	p. 44	
		4.2.1 Condições de Contorno	p. 46	
	4.3	Parâmetros e Variáveis de Interesse	p. 48	
	4.4	Modelo Numérico	p. 50	
		4.4.1 Discretização das Equações	p. 50	

		4.4.2	Discretização do Domínio	p. 55		
5	Veri	<b>Verificação e Validação</b> p				
	5.1	Verific	ação	p. 60		
		5.1.1	Verificação da Solução Numérica	p. 60		
		5.1.2	Verificação do Código Computacional	p. 64		
		5.1.3	Simulações Numéricas	p. 64		
	5.2	Benchr	narks	p. 73		
	5.3	Validaç	ção	p. 75		
		5.3.1	Resultados Experimentais	p. 76		
		5.3.2	Resultados Numéricos	p. 78		
6	Otin	nização		p. 84		
	6.1	Casos	Abordados	p. 85		
	6.2	Otimiz	ação de Tubeiras Cônicas	p. 87		
	6.3	Otimiz	ação de Tubeiras Parabólicas	p. 89		
	6.4	Otimiz	ação de Tubeiras Sino	p. 93		
	6.5	Otimiz	ação da Tubeira de Rao (1958)	p. 100		
7	Con	clusão		p. 102		
	7.1	Resulta	ados	p. 102		
	7.2	Contril	puições	p. 103		
	7.3	Traball	nos Futuros	p. 104		
<b>Referências Bibliográficas</b> p.						
Ap	Apêndice A – Benchmarks					

**Apêndice B – Leituras do gráfico do trabalho de Back, Massier e Gier (1965)** p. 114

Anexo A - Coeficientes usados para determinação das	propriedades				
termoquímicas	p. 116				
Anexo B – Coeficientes usados para determinação da condutividade térmica					
Anexo C – Coeficientes usados para determinação da viscosidade	p. 118				
Anexo D – Propriedades termofísicas do ar	p. 119				

### 1 Introdução

Neste capítulo introdutório é apresentado o problema tratado no presente trabalho, que se constitui em avaliar quanto as condições de operação, os parâmetros geométricos e o modelo matemático usado para simular o escoamento afetam a geometria ótima de tubeiras. Outro objetivo do trabalho é a otimização da geometria de tubeiras de motores-foguete. São apresentados ainda, a motivação, os objetivos e o delineamento deste trabalho.

### 1.1 Definição do Problema

Com o objetivo de aumentar a eficiência de uma turbina a vapor, no ano de 1888, o inventor sueco Gustaf de Laval desenvolveu um bocal contendo uma seção convergente seguida de uma seção divergente. Tais bocais são conhecidos como bocais convergente-divergente, ou ainda, bocais de Laval.

Diferentes formas e tamanhos de bocais de Laval são encontrados na literatura e utilizadas em projetos de foguetes. Tais bocais, ou tubeiras, podem ser classificados de acordo com a forma da parede da seção divergente, em três principais tipos: cônico, sino e parabólico, ilustradas nesta ordem na Fig. 1.1.



Figura 1.1: Tipos de tubeiras: (a) perfil cônico; (b) perfil sino; (c) perfil parabólico [adaptado de Sutton e Biblarz (2000)].

Dentre as tubeiras convergente-divergente, a mais simples é construída em formato cônico, normalmente com semi-ângulo de 15<sup>o</sup> na parede da seção divergente. Além da tubeira de formato cônico, outras formas surgiram na busca do aumento de desempenho. Rao (1958) propôs uma tubeira, em forma de sino, cujo coeficiente de empuxo é superior ao da tubeira com perfil cônico de mesmo comprimento e razão de área.

Tubeiras cônicas geralmente têm perdas de desempenho inaceitáveis devido à grande divergência de fluxo. Estas perdas podem ser reduzidas pelo uso de seções divergentes com contornos que redirecionam o fluxo de volta para a direcção axial. Arcos circulares, contornos parabólicos e em forma de sino são comumente utilizados para esse fim (HOFFMAN, 1987).

Posteriormente, outros autores propuseram tubeiras com menor comprimento, objetivando reduzir o peso da estrutura sem perda significativa no desempenho do motor-foguete. Dentre os perfis do tipo sino modificado, o mais empregado é de 80% do comprimento do perfil sino tradicional. Tal perfil é conhecido como parabólico, pois a forma da seção divergente da tubeira é aproximada por uma função parabólica (SUTTON; BIBLARZ, 2000).

Estudos sobre a geometria ideal para tubeiras, modelos unidimensionais, testes estáticos em bancadas e códigos computacionais foram realizados durante as últimas décadas. Muitos destes estudos foram desenvolvidos com o objetivo de aprimorar o conhecimento sobre a fenomenologia do escoamento em motores-foguete (ARAKI, 2007).

A determinação das características do escoamento de um fluido é de fundamental importância no desenvolvimento de projetos dos mais diversos equipamentos. Em especial, o projeto da tubeira de um motor-foguete é essencialmente desenvolvido com base no conhecimento do escoamento dos gases em seu interior. As características desse escoamento podem ser determinadas basicamente através de análise experimental ou de uma previsão teórica, ou ainda, ambas combinadas.

As análises experimentais são realizadas em bancadas de testes ou, no caso de escoamentos aerodinâmicos, são utilizados túneis de vento, onde são simuladas as condições do escoamento. As características do fluxo são determinadas através de sensores apropriadamente instalados em protótipos ou maquetes. Esses experimentos geralmente envolvem um custo bastante elevado (LAROCA, 2000).

A previsão teórica de um escoamento é feita usualmente resolvendo-se um sistema de equações diferenciais parciais, composto basicamente pelas equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia. Com a solução dessas equações são obtidos os campos de velocidade, pressão, temperatura e massa específica do fluido.

Em casos particulares, pode-se obter uma solução analítica para o modelo matemático, utilizando-se o método das características. Entretanto, em muitas aplicações práticas, os escoamentos possuem características que não admitem simplificações adequadas para permitir uma solução deste tipo, como exemplo, no caso de geometrias complexas ou quando não é possível admitir propriedades físicas constantes. Assim, a forma mais adequada para se fazer uma previsão teórica é através da simulação numérica, ou seja, da solução numérica das equações que modelam o escoamento (LAROCA, 2000).

Durante os últimos anos, esquemas numéricos eficientes para a solução das equações de Navier-Stokes para escoamentos compressíveis têm sido desenvolvidos e verificados. Sua principal vantagem é a aplicabilidade universal sem calibração para cada tipo de motor recentemente desenvolvido. Tem sido mostrado com sucesso que estes métodos podem ser usados como uma eficiente ferramenta no desenvolvimento de projetos (HAIDINGER, 1999).

Dentre os métodos numéricos utilizados na resolução de problemas de dinâmica dos fluidos computacional (CFD, do inglês, "*Computational Fluid Dynamics*"), um dos mais empregados é o Método de Volumes Finitos. A escolha de tal método deve-se principalmente a sua robustez e às suas características conservativas (MALISKA, 2010).

O Método de Volumes Finitos consiste basicamente em realizar um balanço de conservação da propriedade para cada volume elementar, a fim de obter a equação aproximada. Tal método é utilizado neste trabalho para obter as condições do escoamento no interior da tubeira, bem como o seu desempenho.

Com o significativo aumento do poder computacional dos últimos anos, torna-se possível um estudo mais detalhista e com maior precisão dos modelos matemáticos envolvidos na previsão do escoamento em tubeiras. Tal melhoria permite uma avaliação mais detalhada no sentido de otimizar as dimensões e a geometria da parede de tubeiras de motores-foguete, o qual é o objetivo deste trabalho.

#### 1.2 Importância do Problema

Os sistemas de propulsão líquida são os principais sistemas de propulsão espaciais, permitindo a conquista do espaço desde a década de 1960. Suas principais vantagens são o alto desempenho e o fato de que eles são bastante controláveis em termos de modulação de empuxo (SUTTON; BIBLARZ, 2000).

Foguetes construídos com motores de propulsão líquida são largamente utilizados por todo

o mundo, devido a seu alto desempenho (CAISSO et al., 2009). Grandes desenvolvimentos em telecomunicações, meteorologia, sensoriamento remoto e na área científica só se tornaram possíveis através do uso de foguetes.

O fluxo em uma tubeira de propulsão é multidimensional, compressível, com fricção e transferência de calor. A solução deste problema é de grande interesse para projetistas de tubeiras (BEANS, 1992).

Melhora no projeto, especialmente com ferramentas de simulação e métodos de fabricação, que transformaram a indústria automotiva e de aeronaves nas décadas de 1990 e 2000 tem igualmente transformado o campo de propulsão espacial. Dentre as principais áreas de melhoria destaca-se a redução de custo e tempo de viagens espaciais (comerciais, científicas, etc), que pode ser alcançada através do aumento do desempenho em termos do empuxo e impulso específico (CAISSO et al., 2009).

Simulações numéricas têm contribuído significativamente na redução do tempo de duração do desenvolvimento de projetos, eliminando ensaios experimentais e o processo de tentativa e erro, que empregavam muito tempo no passado (CAISSO et al., 2009).

Futuras explorações espaciais exigirão aumento na fração de carga útil e redução da massa do sistema. Consequentemente, maximizar o desempenho de motores-foguete é um importante objetivo do projeto. Maximizar o empuxo para um motor-foguete pode ser alcançado através da otimização da geometria da tubeira (ARRINGTON; REED; RIVERA JR., 1996).

O projeto de futuros motores-foguete requer que muitos parâmetros sejam otimizados para alcançar a mais efetiva configuração (PAVLI; KACYNSKI; SMITH, 1987). O aumento do desempenho do motor-foguete tem significativo efeito sobre a capacidade de carregamento do foguete. No caso do ARIANE ou H2, por exemplo, cada segundo de impulso específico adicional no motor resulta em um incremento em torno de 100*kg* na carga útil (CAISSO et al., 2009).

Devido à alta relação entre o peso bruto do foguete e o peso de carga útil requerido para missões espaciais, a eficiência em peso de um sistema de propulsão pode ter um grande efeito na carga útil. Se, por exemplo, o peso de carga útil é 1% do peso bruto, um incremento de 1% na eficiência da tubeira deve permitir que o peso da carga útil quase dobre. Reciprocamente, se o peso de uma tubeira for reduzido sem perda de eficiência, a economia no peso da tubeira pode ser aplicada diretamente ao peso da carga útil (FARLEY; CAMPBELL, 1960).

#### 1.3 Objetivos do Trabalho

O objetivo geral deste trabalho é determinar a geometria da seção divergente da tubeira, considerando diferentes modelos matemáticos, condições de contorno na parede, áreas de garganta, raios de curvatura na garganta e condições de operação (pressão de estagnação e temperatura de estagnação). Além disso, avaliar o quanto e como essas diferentes considerações influenciam a geometria ótima da tubeira.

Os objetivos específicos deste trabalho consistem em:

- utilizando as técnicas de verificação e validação, estimar o erro oriundo da aproximação numérica da solução do sistema de equações diferenciais, a fim de mensurar a qualidade das soluções obtidas e validar o código computacional Mach2D;
- obter resultados computacionais com grande acurácia para que possam ser utilizados como referência (*benchmarks*) na verificação de outros códigos computacionais;
- implementar um código computacional, denominado DEPP, baseado no algoritmo de Evolução Diferencial (DE), utilizando programação paralela, para a busca da solução ótima para os diferentes tipos de tubeiras;
- acoplar o DEPP ao Mach2D;
- determinar a geometria de tubeiras cônicas, parabólicas e sino, cujo desempenho seja o melhor possível; e
- avaliar a influência das condições de operação (pressão de estagnação e temperatura de estagnação), condição de contorno na parede, parâmetros geométricos (raio da garganta e raio de curvatura na garganta) e dos modelos físico e matemático utilizados na simulação do escoamento, sobre a geometria da tubeira ótima, para operação no vácuo.

#### 1.4 Estrutura do Trabalho

No Capítulo 2 é apresentada a revisão bibliográfica sobre trabalhos que abordam a avaliação do desempenho de diferentes tipos de tubeiras, com o objetivo de determinar as características de uma tubeira com desempenho ótimo. Detalhes sobre o algoritmo e o programa implementado para a otimização da geometria das tubeiras são apresentados no Capítulo 3.

O modelo matemático que representa o escoamento no interior da tubeira, as variáveis de interesse e as aproximações numéricas utilizadas para avaliar as propriedades termodinâmicas

são apresentados no Capítulo 4. No Capítulo 5 são apresentadas as metodologias utilizadas para avaliar a qualidade das soluções numéricas obtidas pelo Mach2D, através da verificação e validação, bem como, os resultados computacionais obtidos nesta etapa.

No Capítulo 6 são apresentados os resultados obtidos nas otimizações dos diferentes tipos de geometrias avaliadas. Por fim, no capítulo 7, são apresentadas as conclusões e as contribuições obtidas neste trabalho.

## 2 Revisão Bibliográfica

O fluxo em tubeiras é de grande importância em muitas aplicações aeroespaciais. Porém, experimentos que podem reproduzir as condições de operação destas tubeiras são muito caros, ou até impraticáveis. Consequentemente, é de grande interesse o desenvolvimento de procedimentos computacionais que permitam simular com acurácia e eficiência o fluxo em tais dispositivos (AZEVEDO, 1992).

O avanço dos métodos numéricos, aliado ao desenvolvimento dos computadores, permite que problemas de escoamento de fluidos com transferência de calor e massa possam ser resolvidos com eficiência e acurácia. Isto, permite a integração das ferramentas de simulação numérica aos procedimentos de projetos nas diversas áreas, como aerodinâmica, automotiva, ambiental, petrolífera, química, entre outras (MALISKA, 2010).

NASA, ESA, e outras agências aeroespaciais tem realizado previsões de desempenho utilizando dinâmica dos fluidos computacional (TSUBOI; ITO; MIYAJIMA, 2008). Wang e Chen (1993) e Wang (2006) realizaram simulações bi e tridimensionais para estimar o desempenho do *Space Shuttle Main Engine* (SSME).

Desde a década de 1950 diversas pesquisas têm sido realizadas com o objetivo de otimizar as características de tubeiras. Neste capítulo são apresentados os trabalhos cujo foco principal foi a otimização de uma ou mais características da tubeira.

Devido ao melhor desempenho, semi-ângulo de 15<sup>o</sup> na parede da seção divergente é quase que unanimidade quando projetos de tubeiras cônicas são desenvolvidos. Porém, estudos experimentais realizados por Bloomer, Antl e Renas (1961) revelam que para tubeiras de mesmo comprimento, as com semi-ângulo de 20 e 25<sup>o</sup> possuem desempenho superior em condições de vácuo. Tal vantagem em relação a tubeiras de 15<sup>o</sup> pode chegar a 1% no coeficiente de empuxo. Tais resultados motivam estudos mais aprofundados sobre qual seria o melhor ângulo para a seção divergente de uma tubeira cônica.

A correta escolha da razão de área deve ser considerada em foguetes sempre que se deseja operar em altas altitudes onde a pressão ambiente pode ser desprezada. Sob tais condições, o impulso específico do motor aumenta monotonicamente com o aumento da razão de área, mas o incremento do peso da tubeira degrada o desempenho. Consequentemente, pode ser procurada uma razão de área que forneça máximo desempenho (GOLDSMITH, 1958).

A investigação realizada por Goldsmith (1958) objetivou desenvolver um método sistemático para determinar a razão de área ótima. Tal trabalho foi baseado em uma solução analítica para o problema linearizado.

Baseado no fato de que o formato da seção divergente da tubeira é uma característica importante para todos os motores que produzem empuxo por meio da ejeção de gases, Rao (1958) desenvolveu uma metodologia para a determinação da forma ótima de tubeiras de perfil sino, denominadas tubeiras de Rao.

Rao (1958) determinou o perfil ótimo da tubeira resolvendo o escoamento invíscido e isentrópico pelo método das características. Para tanto, assumiu que o fluxo de massa, a pressão ambiente e o comprimento da tubeira são conhecidos. Muitos projetos de motores-foguete utilizam esse método com uma correção devido à camada limite (PAVLI; KACYNSKI; SMITH, 1987; SMITH; PAVLI; KACYNSKI, 1987).

Significativo aumento de desempenho foi obtido por Rao (1958), reportando um incremento de até 2,3% no coeficiente de empuxo da tubeira otimizada em relação a uma tubeira cônica de mesmo comprimento e razão de área. Ele obteve porém, apenas 82,7% do máximo empuxo possível, atribuído a uma tubeira ideal cujo comprimento é livre e o desempenho é máximo. Tal desempenho é obtido através da expansão dos gases à pressão ambiente, utilizando-se uma geometria projetada para obter um jato paralelo e uniforme na saída. A principal dificuldade de obtenção da tubeira ideal, é que, se a pressão ambiente é relativamente baixa, a tubeira deve ser excessivamente longa e, consequentemente, muito pesada.

Ainda no mesmo trabalho, Rao (1958) mostrou que a variação do comprimento da tubeira ou da razão entre calores específicos tem efeito considerável na forma de tubeiras ótimas. Observou também que a comparação do coeficiente de empuxo indica que as vantagens da tubeira ótima são maiores quanto maior for a razão de área.

O método de Rao tem sido utilizado em muitos estudos de diferentes classes de motores-foguete com uma grande variedade de resultados. Para motores com número de Reynolds maior que 10<sup>5</sup>, a otimização de Rao (1958) é muito eficiente, porque a relação entre o fluxo na camada limite e o fluxo total é pequeno (ARRINGTON; REED; RIVERA JR., 1996). Porém, em propulsores muito pequenos, com número de Reynolds menores que 10<sup>4</sup>, efeitos da camada limite viscosa são grandes em comparação ao fluxo total e uma tubeira com contorno

sino não é tão eficaz. Estudos mostraram que nestas condições tubeiras cônicas possuem desempenho significativamente maior do que as tubeiras otimizadas por Rao (ARRINGTON; REED; RIVERA JR., 1996).

Em um estudo realizado por Farley e Campbell (1960), três tubeiras otimizadas pelo método de Rao foram comparadas a uma tubeira cônica de 15<sup>0</sup> na parede da seção divergente. Todas as tubeiras utilizadas foram projetadas com raio na garganta de 0,06 m e razão de área entre 10 e 25. Os valores do empuxo obtidos pelas tubeiras otimizadas foram maiores que os obtidos com a tubeira cônica.

Hoffman (1987) desenvolveu um método para determinar tubeiras truncadas comprimidas perfeitas e predizer o seu desempenho. Tais tubeiras são obtidas pelo truncamento do comprimento de tubeiras perfeitas e posterior compressão linear da geometria da seção divergente, produzindo tubeiras extremamente curtas. As tubeiras perfeitas tem a a concepção de uma tubeira com fluxo uniforme paralelo na saída.

Hoffman (1987) concluiu que tubeiras de Rao rendem maior desempenho que tubeiras truncadas comprimidas perfeitas. Porém, as diferenças de desempenho são muito pequenas (entre 0,04 e 0,34%), o que mostra que tubeiras truncadas comprimidas perfeitas são tubeiras com boa propulsão, criando desta forma uma opção para envelopes (tubeiras de igual comprimento e razão de área) para o qual o conceito da tubeira de Rao falha.

Com o desenvolvimento dos computadores, diversos estudos têm sido realizados nos últimos anos, com o objetivo de determinar de forma mais precisa o contorno de uma tubeira com desempenho máximo, bem como a influência das características da tubeira em seu desempenho (MANSKI; HAGEMANN, 1996; CAI et al., 2007; EYI; EZERTAS; YUMUSAK, 2011).

Utilizando diversas suposições de simplificação, tais como fluxo de gás ideal isentrópico, flutuação turbulenta na camada limite, parede adiabática e abordagem unidimensional, Manski e Hagemann (1996) realizaram simulações do fluxo em tubeiras sino para estudar as perdas de empuxo devido à influência de suas características. No trabalho de Manski e Hagemann (1996) foram avaliadas várias pressões na câmara, raios da garganta, razões de área, razões de mistura, ângulos de inclinação da parede na saída e método de resfriamento na caracterização da tubeira, a fim de estudar a influência de cada uma dessas características. Os resultados apresentados por Manski e Hagemann (1996) fornecem compreensão de várias perdas de desempenho de tubeiras de motores-foguete de propulsão líquida e a dependência destas perdas na caracterização da tubeira. Dentre os principais resultados obteve-se que a eficiência da tubeira atinge valor máximo em um ângulo da parede na saída de 8 graus.

Utilizando dinâmica dos fluidos computacional, Cai et al. (2007) empregaram decomposição LU implícita para resolver as equações bidimensionais axissimétricas de Navier-Stokes e de transporte, para realizar a previsão de desempenho e otimização da tubeira de motores-foguete. Os termos do fluxo convectivo e fonte química foram tratados implicitamente, enquanto que os termos viscosos foram tratados explicitamente. No trabalho de Cai et al. (2007), o comprimento e a razão de área são prescritos, e interpolação por spline cúbica foi utilizada para determinar a forma sino da parede da tubeira. A otimização foi realizada utilizando Programação Quadrática, Algoritmo Genético e Estratégia de Interdigitação. O Algoritmo Genético e a Estratégia de Interdigitação geraram quase a mesma geometria ótima, cuja melhora foi de aproximadamente 1,5% no coeficiente de empuxo no vácuo, em relação ao perfil sino inicial.

Eyi, Ezertas e Yumusak (2011) realizaram uma investigação cujo objetivo foi desenvolver uma ferramenta de projeto confiável e eficiente, que possa ser utilizada em fluxos com reação química. Tal ferramenta foi utilizada para resolver o escoamento axissimétrico invíscido e com taxa finita de reação, para a otimização da forma da tubeira de um motor-foguete. Nesse trabalho, Eyi, Ezertas e Yumusak (2011) utilizaram um total de dez funções Hicks-Henne para variar a geometria da tubeira, iniciando da garganta para a saída. As áreas da garganta e da saída foram fixadas, e aproximadamente 2,56% de incremento de empuxo no vácuo foi obtido na tubeira otimizada em relação à tubeira original de perfil cônico.

Diversos outros trabalhos foram realizados ao longo das últimas décadas com o objetivo de comparação e análise de desempenho de diversos tipos e tamanhos de tubeiras de foguetes (ARRINGTON; REED; RIVERA JR., 1996; BEANS, 1992; CAMPBELL; FARLEY, 1960; KEELING, 1993; ALLMAN; HOFFMAN, 1981). Tais trabalhos incluem a comparação entre vários tipos de tubeiras, razões de área, pressões na câmara, entre outras características. Convém destacar que nas primeiras pesquisas realizadas sobre otimização da forma e das dimensões da tubeira, ainda na década de 1950, o fluxo no interior da tubeira é aproximado por modelos unidimensionais ou quase-unidimensionais, não retratando com significativa fidelidade a natureza de tal fenômeno físico. Atenta-se, outrossim, ao fato de que o escoamento real na tubeira apresenta um comportamento bidimensional, em que os campos das propriedades variam não apenas axialmente ao longo da linha de simetria do motor foguete, mas também radialmente (ARAKI, 2007).

Destaca-se ainda, que em todos os trabalhos de otimização de tubeiras realizados com simulações numéricas ao longo dos últimos anos, foram fixados o comprimento e a razão de área da tubeira, limitando-se a realizar a otimização para um envelope em específico (MANSKI;

#### HAGEMANN, 1996; CAI et al., 2007; EYI; EZERTAS; YUMUSAK, 2011).

Nenhum estudo sobre a influência das condições de operação, tais como pressão de estagnação, temperatura de estagnação, condição de contorno na parede, nem sobre os parâmetros geométricos, tais como comprimento, raio da garganta e raio de curvatura na garganta, sobre a geometria ótima da tubeira foi encontrado.

### 3 Método de Otimização

Problemas que envolvem otimização global sobre espaços contínuos são muito comuns na comunidade científica. O primeiro passo na otimização consiste em escolher uma função que modela os objetivos do problema. Sobre as variáveis desta função podem ser aplicadas quaisquer restrições. Quando a função objetivo é não linear e não diferenciável, as abordagens com busca direta são mais indicadas (STORN; PRICE, 1997).

### 3.1 O Algoritmo de Evolução Diferencial

O algoritmo de Evolução Diferencial (DE) é uma estratégia de busca direta bastante conhecida, apesar de ter sido desenvolvida muito recentemente (FEOKTISTOV, 2006). Dentre as vantagens da DE, destacam-se a robustez, boas propriedades de convergência e a habilidade em lidar com funções objetivos não diferenciáveis e não lineares. A grande facilidade de uso e de paralelização são outras características importantes desta metodologia.

DE é uma meta-heurística que se fundamenta em princípios da teoria da evolução e seleção natural e utiliza modelos destes processos naturais para a solução de problemas (STORN; PRICE, 1995). O DE é adequado para tratar funções com muitos mínimos, descontínuas ou com precisão insuficiente para o cálculo numérico de suas derivadas, caso comum em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD).

DE é um algoritmo evolucionário, isto é, ele realiza a evolução de uma população de indivíduos de alguma maneira inteligente. A geração de novos indivíduos é obtida pelo uso de diferenças entre indivíduos da população atual, utilizando uma forma simples e rápida chamada operador diferencial (FEOKTISTOV, 2006).

O algoritmo DE é inicializado com um conjunto de palpites, usualmente aleatórios e espalhados por todo o espaço de busca. Cada palpite, chamado indivíduo, é dado por um vetor composto por valores para todas as variáveis da função objetivo, denominados cromossomos. O conjunto de todos os indivíduos é chamado de população.
Cada nova população é gerada com base nos cromossomos dos indivíduos da população anterior, utilizando operadores diferenciais. Os cromossomos de cada indivíduo podem, ou não, ser recombinados. O valor de cada cromossomo é dado por uma combinação linear dos valores dos cromossomos de três indivíduos escolhidos aleatoriamente.

O pseudocódigo do algoritmo de DE é apresentado na Tab. 3.1. Neste algoritmo, a função int(a) extrai a parte inteira do número real *a*; a função rand(a,b) gera um número aleatório entre *a* e *b*; e a função fnc(X) calcula a aptidão do indivíduo *X*.

O primeiro passo do algoritmo DE é receber os dados de entrada (linhas 2 a 5). Os principais dados de entrada do algoritmo do DE são: o número de incógnitas ( $N_u$ ), o tamanho da população ( $N_p$ ), o número de gerações ( $N_g$ ) e as constantes de diferenciação (D) e de cruzamento ( $P_c$ ). Além destas informações, o algoritmo deve receber os valores mínimos e máximos para cada incógnita (cromossomo), denotadas por  $X_{min}$  e  $X_{max}$ , respectivamente.

A inicialização da variável que contém a posição do indivíduo com melhor aptidão  $(i_{best})$ é realizada na linha 6. Na sequência, linhas 7 a 16, são gerados aleatoriamente os indivíduos (X) da população inicial (P), avaliada a aptidão  $(\hat{F})$  de cada um destes indivíduos e atualizada a variável  $i_{best}$ , para indicar a posição do indivíduo da população com melhor aptidão.

Entre as linhas 17 e 46 é realizado o processo iterativo para a evolução da população para o ótimo global. Este processo é repetido  $N_g$  vezes e pode ser dividido basicamente em quatro passos: geração de novos indivíduos através da combinação linear dos indivíduos atuais, aplicação das restrições sobre os indivíduos gerados, avaliação da aptidão destes indivíduos e seleção dos indivíduos com melhor aptidão.

O primeiro passo da evolução da população consiste de escolher aleatoriamente três indivíduos ( $l, m \in n$ ) distintos entre si (linhas 19 a 23). Com probabilidade  $P_c$ , estes indivíduos são combinados linearmente, utilizando a constante de diferenciação (D), dando origem a um novo indivíduo (linhas 25 a 34).

A aptidão de cada um dos novos indivíduos gerados é obtida pela função objetivo na linha 35. Se a aptidão do novo indivíduo for maior do que a aptidão do indivíduo atual, troca-se o indivíduo atual pelo novo. Além disso, se a aptidão do indivíduo atual é superior a aptidão do melhor indivíduo, este também é atualizado pelo novo indivíduo. Todo este procedimento é apresentado entre as linhas 36 e 44. Ao final do algoritmo a solução ótima estará em  $P(i_{best},:)$ e a aptidão desta solução será  $\hat{F}(i_{best})$ .

Tabela 3.1: Pseudocódigo do algoritmo de Evolução Diferencial.

01	Início do DE
02	Receber: $N_u, N_p, N_g, D, P_c$
03	Para $i \leftarrow 1, N_u$
04	Receber: $X_{min}(i), X_{max}(i)$
05	Fim
06	$i_{best} \leftarrow 1$
06	$g \leftarrow 0$
07	Faça $j \leftarrow 1, N_p$
08	Faça $i \leftarrow 1, N_u$
09	$X(i) \leftarrow X_{min}(i) + (X_{max}(i) - X_{min}(i)) \cdot rand(0,1)$
10	$P(i,j) \leftarrow \overline{X(i)}$
11	Fim do faça
12	$\hat{F}(j) \leftarrow fnc(X)$
13	Se $(\hat{F}(j) > \hat{F}(i_{best}))$ então
14	$i_{best} \leftarrow j$
15	Fim do se
16	Fim do faça
17	Faça $g \leftarrow 1, N_g$
18	Faça $j \leftarrow 1, N_p$
19	Repetir
20	$l \leftarrow int(rand(0, N_p) + 1)$
21	$m \leftarrow int(rand(0, N_p) + 1)$
22	$n \leftarrow int(rand(0, N_p) + 1)$
23	Enquanto $((l = m) \parallel (l = n) \parallel (m = n) \parallel (l = j) \parallel (m = j) \parallel (n = j))$
24	$Rnd \leftarrow int(rand(0, N_u) + 1)$
25	Faça $i \leftarrow 1, N_u$
26	Se $((rand(0,1) < P_c) \parallel (Rnd = i))$ então
27	$X(i) \leftarrow P(i,n) + D \cdot (P(i,l) - P(i,m))$
28	Se $((X(i) < X_{min}(i)) \parallel (X(i) > X_{max}(i)))$ então
29	$X(i) \leftarrow X_{min}(i) + (X_{max}(i) - X_{min}(i)) \cdot rand(0,1)$
30	Fim do se
31	Senão
32	$X(i) \leftarrow P(i,j)$
33	Fim do se
34	Fim do faça $\overline{D}$
33 26	$F \leftarrow Jnc(\mathbf{X})$ So $(\bar{E} > \hat{E}(i))$ ant $\tilde{c}$
20 26	Se $(F > F(j))$ entao
20	$P(i;i) \leftarrow V(i)$
20 20	$P(l, j) \leftarrow \Lambda(l)$ Find a face
39 40	$\hat{F}(i) \neq E$
40	$\Gamma(j) \leftarrow \Gamma$ So $(\hat{F}(i) > \hat{F}(i,))$
	$\int \mathcal{S} \left( I \left( J \right) > I \left( lbest \right) \right)$
+2 Δ3	$\frac{\nu_{best} \leftarrow J}{\text{Fim do se}}$
	Fim do se
Δ5	Fim do faca
46	Fim do faça
47	Fim do DF
/	

# 3.2 O Método de Superfície de Resposta

O algoritmo DE foi hibridizado com o Método de Superfície de Resposta (RSM, do inglês, *"Response surface methodology"*). Tal método é adequado nas vizinhanças do mínimo, pois sua taxa de convergência é maior do que a do DE puro, acelerando a convergência do algoritmo modificado (VINCENZI; SAVOIA, 2010).

A hibridização do algoritmo DE com o RSM consiste em aproximar a função objetivo por uma função quadrática. Para obter esta função quadrática é selecionado um conjunto de  $N_{rsm}$ indivíduos. O valor mínimo de  $N_{rsm}$  depende do número de incógnitas ( $N_u$ ) do problema, e é determinado pela seguinte expressão:

$$N_{rsm} \ge \frac{(N_u + 1) \cdot (N_u + 2)}{2}$$
 (3.1)

Os indivíduos mais aptos são selecionados para gerar a função quadrática, podendo ser utilizado até a totalidade de indivíduos da população. A função quadrática é ajustada aos indivíduos selecionados, conforme descrito por Vincenzi e Savoia (2010). As coordenadas do ótimo desta função são determinadas e utilizadas como valores dos cromossomos de um indivíduo ( $X_{rsm}$ ) da nova geração.

# 3.3 O Código Computacional DEPP

O algoritmo de DE hibridizado com o RSM (DE-RSM) foi utilizado neste trabalho para obter a geometria ótima das tubeiras. Baseado em tal metodologia foi desenvolvido um programa computacional, chamado DEPP (do inglês, "*Differential Evolution Parallel Program*"), responsável pela otimização das variáveis de interesse definidas para cada um dos três tipos de tubeira.

O DEPP deve receber basicamente os seguintes dados de entrada: tamanho da população  $(N_p)$ , número de gerações  $(N_g)$ , constante de diferenciação (D), probabilidade de cruzamento  $(P_c)$ , número de incógnitas  $(N_u)$  e o intervalo de busca de cada uma destas incógnitas, denotados respectivamente pelos vetores  $X_{min}$  e  $X_{max}$ .

O código implementado é apto a resolver qualquer problema de otimização global. Um programa serial auxiliar é responsável pelo cálculo da aptidão de cada indivíduo gerado pelo DEPP, o que torna fácil a aplicação deste programa a qualquer problema, apenas criando um programa auxiliar específico para calcular a função objetivo que se deseja otimizar.

O DEPP foi implementado em linguagem Fortran 95 e utiliza as diretivas do MPI (*Message Passing Interface*) para processamento paralelo. O código-fonte do DEPP está disponível no seguinte endereço: http://depp.googlecode.com/svn/trunk. Neste mesmo endereço está o código-fonte do programa auxiliar, utilizado para calcular a aptidão das funções teste para a validação do DEPP.

Sobre o algoritmo apresentado na seção 3.1 foram implementadas algumas adaptações para a hibridização do DE com o RSM. Entre as linhas 17 e 18 são calculados os coeficientes da função quadrática que melhor se ajusta aos indivíduos da população anterior. As coordenadas do ótimo da função quadrática são determinadas e utilizadas como um indivíduo da próxima população.

Para reduzir o tempo computacional e, consequentemente, viabilizar o uso do DEPP na otimização de tubeiras, as linhas do código responsáveis pelo cálculo da aptidão de cada indivíduo são executadas de forma paralela. No algoritmo apresentado na seção 3.1 o processamento paralelo é realizado entre as linhas 19 e 35.

# 3.4 Validação do DEPP

Para a validação do DEPP foram utilizadas as funções testes de Ackley e Rastrigin. Tais funções são problemas clássicos destinados a avaliar a eficiência e convergência de algoritmos de busca. As expressões das funções de Ackley e Rastrigin para *n* incógnitas são dadas, respectivamente, por (COLEY, 1999):

$$f = 20 \exp\left(-0.2\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_{i}^{2}}\right) + \exp\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\cos(2\pi x_{i})\right) - 20 - \exp(1), \quad -33 \le x_{i} \le 33 \quad (3.2)$$

$$f = -\sum_{i=1}^{n} \left( x_i^2 - 10\cos(2\pi x_i) + 10 \right), \quad -5,12 \le x_i \le 5,12$$
(3.3)

Nas Figuras 3.1 e 3.2 são apresentados os gráficos das funções de Ackley e Rastrigin, respectivamente. Em tais figuras podemos observar que as funções objetivo possuem muitos ótimos locais, o que dificulta a obtenção do ótimo global por métodos baseados em gradientes.

A mesma característica das funções testes unidimensionais são repetidas em problemas de mais alto grau, como pode-se observar nas curvas de nível das funções de Ackley e Rastrigin bidimensionais, apresentadas nas Figuras 3.3 e 3.4, respectivamente. O ótimo global para ambas



as funções testes é dado pelo vetor nulo de dimensão  $N_u$ .

Figura 3.1: Função de Ackley unidimensional.



Figura 3.2: Função de Rastrigin unidimensional.



Figura 3.3: Curvas de nível da função de Ackley bidimensional.



Figura 3.4: Curvas de nível da função de Rastrigin bidimensional.

A otimização das funções de Ackley e Rastrigin foram simuladas com até cinco incógnitas. Para mensurar a convergência da solução, os resultados obtidos em cada indivíduo da população foram adimensionalizados pela diferença entre o  $x_{max}$  e o  $x_{min}$ . O resultado adimensionalizado de cada indivíduo da população foi subtraído da média de todos os indivíduos da geração adimensionalizados. Por fim, a medida da convergência foi obtida pela norma Euclidiana destas diferenças.

Pelas Figs. 3.5 e 3.6 pode-se observar que o programa computacional desenvolvido convergiu em todos os testes realizados. Além disto, pode-se observar que, para a função de Ackley, o número de iterações utilizadas pelo DE hibridizado é aproximadamente 40% menor do que com o algoritmo DE puro. Tal diferença é ainda maior quando compara-se o número de iterações para a função de Rastrigin, onde no algoritmo hibridizado são necessárias aproximadamente 35% do número de iterações do DE puro.



Figura 3.5: Desempenho do DEPP na otimização da função de Ackley.



Figura 3.6: Desempenho do DEPP na otimização da função de Rastrigin.

# 4 Modelagem Matemática e Numérica

O presente trabalho é dividido em duas partes bem definidas, a simulação do escoamento do fluido no interior de uma tubeira de características pré-definidas e a otimização da geometria desta tubeira. A escolha do modelo matemático adequado interfere significativamente na qualidade da representação do fenômeno físico que se deseja simular.

Neste capítulo são apresentados os modelos físicos (escoamentos monoespécie e congelado), o modelo matemático e o esquema numérico utilizado no código Mach2D para a simulação do escoamento no interior da tubeira. Os principais parâmetros e variáveis relacionados ao desempenho de uma tubeira também são apresentados neste capítulo.

# 4.1 Modelo Físico

No desenvolvimento deste trabalho, dois modelos físicos diferentes serão adotados para simular o escoamento no interior da tubeira: monoespécie e congelado. Para cada um dos modelos citados, algumas considerações são apresentadas na sequência.

### 4.1.1 Escoamento Monoespécie

Para o escoamento monoespécie foi utilizado um gás monoespécie ( $H_2O$ ) compressível com propriedades ( $c_p, \gamma, \mu \in \kappa$ ) constantes ou variáveis. Os efeitos viscosos, de troca de calor e de dissipação viscosa podem, ou não, ser desprezados. Admite-se um escoamento não-reativo em regime laminar permanente. A condição de contorno aplicada à parede pode ser de adiabaticidade ou não.

## 4.1.2 Escoamento Congelado

Em escoamentos onde a velocidade do fluido é muito superior à velocidade das reações químicas, o tempo de permanência dos gases no interior da tubeira é muito pequeno. Neste

caso, praticamente não se verificam alterações na composição química dos gases no interior da tubeira. Supõe-se, assim, que a composição química dos gases seja a mesma desde a câmara de combustão até a exaustão da tubeira. Tal condição é conhecida como modelo de escoamento congelado (ANDERSON JR., 1990).

A diferença básica entre os modelos físicos de escoamento monoespécie e o escoamento congelado é o fato de que este último contempla uma mistura de gases, com até oito espécies do par propelente  $H_2/O_2$ . Desta forma, são obtidas as propriedades termofísicas para cada espécie que compõe a mistura, sendo avaliadas as propriedades da mistura, utilizando-se, para tanto, as frações mássicas de cada espécie.

O modelo químico utilizado neste trabalho para simular o escoamento congelado é apresentado por Svehla (1964). Tal modelo é composto por quatro reações químicas envolvendo seis espécies:  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $H_2$ , OH,  $O \in H$ . As seguintes reações são consideradas neste modelo:

$$H_2 \rightleftharpoons 2H$$
 (4.1)

$$O_2 \rightleftharpoons 2O$$
 (4.2)

$$2H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O \tag{4.3}$$

$$O + H \rightleftharpoons OH$$
 (4.4)

## 4.2 Modelo Matemático

O escoamento dos gases no interior da tubeira possui natureza tridimensional, porém, por diversas vezes tal comportamento é idealizado por meio de um modelo bidimensional axissimétrico. Neste caso, observa-se que os campos de temperatura, pressão e velocidade variam apenas ao longo do raio e do eixo de simetria da tubeira.

O modelo matemático bidimensional axissimétrico é baseado nas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento linear, de energia e na equação de estado, apresentadas nesta ordem, considerando-se um escoamento em regime permanente (CAI et al., 2007):

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{1}{y} \frac{\partial(y\rho v)}{\partial y} = 0$$
(4.5)

$$\frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{1}{y} \frac{\partial(y\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{1}{y} \frac{\partial(y\tau_{xy})}{\partial y}$$
(4.6)

$$\frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{1}{y}\frac{\partial(y\rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial\tau_{xy}}{\partial x} + \frac{1}{y}\frac{\partial(y\tau_{yy})}{\partial y} - \frac{\tau_H}{y} \quad (4.7)$$

$$c_p \frac{\partial(\rho T u)}{\partial x} + \frac{c_p}{y} \frac{\partial(y \rho T v)}{\partial y} + \frac{\partial(p u)}{\partial x} + \frac{1}{y} \frac{\partial(y p v)}{\partial y} = \frac{\partial F_v}{\partial x} + \frac{1}{y} \frac{\partial(y G_v)}{\partial y}$$
(4.8)

р

$$= \rho RT \tag{4.9}$$

onde

$$F_{v} = \tau_{XX}u + \tau_{XY}v + \kappa \frac{\partial T}{\partial x}$$
(4.10)

$$G_{v} = \tau_{XY} u + \tau_{YY} v + \kappa \frac{\partial T}{\partial y}$$
(4.11)

$$\tau_{XX} = -\frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x}$$
(4.12)

$$\tau_{xy} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$
(4.13)

$$\tau_{yy} = -\frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y}$$
(4.14)

$$\tau_H = -\frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) + 2\mu \frac{v}{y}$$
(4.15)

sendo  $\rho$ , *u*, *v*, *p* e *T* as variáveis dependentes, representando a massa específica, a velocidade axial, a velocidade radial, a pressão e a temperatura, respectivamente; *x* e *y*, nesta ordem, as direções axial e radial;  $\mu$  a viscosidade dinâmica;  $\kappa$  a condutividade térmica; e *R* a constante da mistura de gases no interior da tubeira.

Para o escoamento monoespécie de  $H_2O$  com propriedades constantes, o calor específico  $(c_p)$ , a razão entre calores específicos  $(\gamma)$ , a condutividade térmica  $(\kappa)$  e a viscosidade  $(\mu)$  são calculados baseados na temperatura de estagnação, utilizando, respectivamente, as seguintes expressões (MCBRIDE; GORDON; RENO, 1993):

$$c_p = \bar{R}(\hat{a}_1 + \hat{a}_2T + \hat{a}_3T^2 + \hat{a}_4T^3 + \hat{a}_5T^4), \qquad (4.16)$$

$$\gamma = \frac{c_p}{c_p - \bar{R}},\tag{4.17}$$

$$\kappa = 10^{-4} \exp\left(\hat{a}_1 \log T + \frac{\hat{a}_2}{T} + \frac{\hat{a}_3}{T^2} + \hat{a}_4\right), \qquad (4.18)$$

e

$$\mu = 10^{-7} \exp\left(\hat{a}_1 \log T + \frac{\hat{a}_2}{T} + \frac{\hat{a}_3}{T^2} + \hat{a}_4\right)$$
(4.19)

sendo  $\bar{R}$  a constante universal dos gases perfeitos (8,31451 $J/mol \cdot K$ ) e  $\hat{a}_i$ , com i = 1,...,5, os coeficiente fornecidos por McBride, Gordon e Reno (1993) para o cálculo de  $c_p$ ,  $\kappa \in \mu$ , apresentados respectivamente nos Anexos A, B e C.

Para o escoamento monoespécie de  $H_2O$  com propriedades variáveis, os parâmetros termoquímicos são calculados para cada volume de controle e atualizados em cada iteração. No escoamento congelado, tais parâmetros são calculados baseados na mistura de espécies químicas determinada para a entrada da tubeira. Para tanto, utiliza-se a média dos parâmetros, ponderada pelas frações mássicas ( $Y_i$ ) de cada espécie química (KUO, 1986).

### 4.2.1 Condições de Contorno

Sobre o sistema de equações de conservação são aplicadas condições de contorno a fim de solucionar de forma única o modelo matemático. Condições de contorno de adiabaticidade e de impermeabilidade foram utilizadas tanto na parede quanto na linha de simetria da tubeira, ou seja, não há fluxo de calor nem de fluido nas direções normais ( $\vec{n}$ ) à parede e à linha de simetria, conforme Fig. 4.1.



Figura 4.1: Condições de contorno aplicadas ao escoamento no interior da tubeira.

Para simular a utilização de um sistema de refrigeração na parede, a condição de adiabaticidade (contorno norte) foi substituída por temperatura prescrita ( $T_{wall}$ ). Para a simulação do escoamento viscoso é adicionada a condição de não deslizamento do fluido na parede da tubeira, prescrevendo como nula a velocidade do fluido tangencial ao contorno norte.

Na entrada da tubeira a velocidade radial (v) e a derivada da velocidade axial (u) na direção x são prescritas como nulas, conforme ilustrado na Fig. 4.1. Para o escoamento congelado a composição das espécies químicas ( $Y_i$ ) é determinada a partir da razão de mistura (OF), temperatura ( $T_{in}$ ) e pressão ( $p_{in}$ ) na entrada da tubeira.

Na câmara de combustão são prescritas arbitrariamente a temperatura de estagnação  $(T_0)$ e a pressão de estagnação  $(p_0)$ . A partir de tais valores são calculadas a temperatura  $(T_{in})$  e a pressão  $(p_{in})$  na entrada da tubeira, dadas respectivamente por:

$$T_{in} = T_0 - \frac{1}{2}(\gamma - 1) \left(\frac{u_{in}^2}{\gamma R}\right)$$
(4.20)

e

$$p_{in} = p_0 \left( 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_{in}^2 \right)^{\frac{-\gamma}{\gamma - 1}},$$
(4.21)

onde  $\gamma$  é a razão entre calores específicos; *R* é a constante do gás ou da mistura de gases;  $u_{in}$  é a velocidade axial na entrada da tubeira; e

$$M_{in} = \frac{u_{in}}{\sqrt{\gamma RT_{in}}} \tag{4.22}$$

é o número de Mach na entrada da tubeira.

Quando o escoamento é supersônico na saída da tubeira, condições de contorno não são requeridas nesta região. Contudo, para implementação de um modelo numérico, é necessária a aplicação de condições de contorno em tal local. Para tanto, são utilizadas derivadas nulas na direção axial para as variáveis temperatura (T), pressão (p), velocidade axial (u) e velocidade radial (v).

# 4.3 Parâmetros e Variáveis de Interesse

A definição de alguns parâmetros físicos, geométricos e de desempenho é importante na caracterização de um foguete. A seguir são apresentados os principais parâmetros e variáveis de interesse utilizados neste trabalho. Maiores detalhes e outros parâmetros podem ser encontrados em Sutton e Biblarz (2000) e em Kuo (1986).

### Razão de Expansão de Área

A razão de expansão de área, ou simplesmente, razão de expansão ( $\varepsilon$ ), é dada pela relação entre a área da saída ( $A_{exit}$ ) e a área da garganta ( $A_g$ ) da tubeira, ou seja,

$$\varepsilon = \frac{A_{exit}}{A_g}.$$
(4.23)

#### Razão de Mistura

No caso de sistemas bipropelentes, a razão da mistura (OF) é um importante parâmetro de propulsão. Tal parâmetro é definido como a relação entre a vazão mássica de oxidante e a vazão mássica de combustível, ou seja,

$$OF = \frac{\dot{m}_{\text{oxidante}}}{\dot{m}_{\text{combustivel}}}.$$
(4.24)

#### Empuxo no Vácuo

A partir das variáveis diretas obtidas através da resolução do sistema de equações da massa, quantidade de movimento linear e energia, pode-se obter o valor do empuxo. O empuxo (F) é definido como a força produzida pelo sistema de propulsão atuante sobre o foguete, ou seja, é a reação sobre a estrutura do foguete devido à ejeção de matéria em alta velocidade. O empuxo no vácuo pode ser calculado pela seguinte expressão:

$$F = \int_0^{A} exit(\rho u^2 + p) dA, \qquad (4.25)$$

sendo  $\rho$  a massa específica, *u* a velocidade axial e *p* a pressão.

#### Coeficiente de Empuxo no Vácuo

O coeficiente de empuxo no vácuo ( $C_{Fv}$ ) é uma quantidade que reflete a qualidade da geometria de uma tubeira. Tal coeficiente é uma indicação do incremento de empuxo pela expansão do gás através da tubeira em comparação com o empuxo que seria gerado se a pressão da câmara atuasse somente sobre a área da garganta (SMITH; PAVLI; KACYNSKI, 1987). O coeficiente de empuxo é definido como o empuxo dividido pela pressão na câmara e pela área da garganta, ou seja,

$$C_{Fv} = \frac{F}{A_g p_0}.$$
(4.26)

#### Impulso Específico

O impulso específico ( $I_{sp}$ ) representa uma métrica importante do desempenho de um sistema de propulsão. Quanto maior o valor do impulso específico, melhor é o desempenho do sistema. Seu valor é definido como a razão entre o total de empuxo gerado pelo propulsor e o peso de propelente consumido durante o tempo de queima, ou seja,

$$I_{sp} = \frac{\int_{0}^{t_{q}} F dt}{g_{0} \int_{0}^{t_{q}} \dot{m} dt}$$
(4.27)

onde *F* é o empuxo,  $g_0$  é a força de gravidade ao nível do mar, *m* é a vazão mássica e  $t_q$  é o tempo de queima de propelente.

#### Coeficiente de Descarga

O coeficiente de descarga ( $C_d$ ) é uma variável adimensional de desempenho global do motor-foguete. Tal variável é o resultado da razão entre a vazão mássica real (ou calculada) na saída da tubeira e a vazão mássica ideal dos gases de combustão, sendo obtida pela seguinte expressão:

$$C_d = \frac{\dot{m}_{real/calculado}}{\dot{m}_{ideal}}.$$
(4.28)

O coeficiente de descarga ( $C_d$ ) indica o quão distante a vazão mássica real (ou calculada) se encontra do caso ideal (escoamento isentrópico unidimensional).

# 4.4 Modelo Numérico

A obtenção de uma solução numérica para o sistema de equações de conservação está diretamente ligada a um modelo numérico. Neste trabalho é utilizado o Método de Volumes Finitos para a obtenção desta solução. Os detalhes da discretização das equações utilizando este método são apresentados nesta seção, bem como a metodologia utilizada na discretização do domínio físico.

## 4.4.1 Discretização das Equações

O modelo numérico utilizado neste trabalho é baseado no Método de Volumes Finitos com arranjo co-localizado de variáveis e aproximações de primeira ordem para os termos advectivos e segunda ordem para os termos difusivos com correção adiada (MALISKA, 2010). Volumes fictícios são utilizados para a aplicação das condições de contorno.

Devido à forma da tubeira é utilizada malha estruturada com coordenadas curvilíneas. Para isto, o primeiro passo é a transformação do sistema de coordenadas axissimétrico (x - y) em um sistema de coordenadas generalizado  $(\xi - \eta)$  (MALISKA, 2010). Portanto, cada volume do domínio físico é mapeado em um volume do domínio computacional, conforme ilustrado na Fig. 4.2.



Figura 4.2: Mapeamento do domínio físico ao domínio computacional [adaptado de Maliska (2010)].

Considerando que o domínio computacional é construído com volumes quadrados com comprimento de lado unitário, as equações de conservação para o sistema de coordenadas generalizado podem ser escritas da seguinte forma geral:

$$\frac{C^{\Phi}}{y}\frac{\partial(y\rho\bar{U}\Phi)}{\partial\xi} + \frac{C^{\Phi}}{y}\frac{\partial(y\rho\bar{V}\Phi)}{\partial\eta} = P^{\Phi} + S^{\Phi} + \frac{1}{y}\frac{\partial}{\partial\xi}\left[\Gamma^{\Phi}yJ\left(\hat{\alpha}\frac{\partial\Phi}{\partial\xi} - \hat{\beta}\frac{\partial\Phi}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{y}\frac{\partial}{\partial\eta}\left[\Gamma^{\Phi}yJ\left(\hat{\gamma}\frac{\partial\Phi}{\partial\eta} - \hat{\beta}\frac{\partial\Phi}{\partial\xi}\right)\right]$$
(4.29)

onde

$$\bar{U} = u y_{\eta} - v x_{\eta} \tag{4.30}$$

$$\bar{V} = v x_{\xi} - u y_{\xi} \tag{4.31}$$

$$\hat{\alpha} = x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2 \tag{4.32}$$

$$\hat{\beta} = x_{\xi} x_{\eta} + y_{\xi} y_{\eta} \tag{4.33}$$

$$\hat{\gamma} = x_{\xi}^2 + y_{\xi}^2 \tag{4.34}$$

$$J = (x_{\xi} y_{\eta} - x_{\eta} y_{\xi})^{-1}$$
(4.35)

sendo  $\overline{U} \in \overline{V}$  os componentes contravariantes do vetor velocidade;  $\hat{\alpha}$ ,  $\hat{\beta} \in \hat{\gamma}$  componentes do tensor métrico; e *J* o Jacobiano.

Na Eq. (4.29)  $\Phi$  é uma variável dependente genérica, que assume valores iguais a 1, *u*, *v* e *T* para obtermos as equações de conservação da massa, da quantidade de momento axial e radial e da energia, respectivamente. Os coeficientes para cada uma destas equações são apresentados na Tab. 4.1 e nas Eqs. (4.36)-(4.39).

$$S^{1} = 0$$

$$S^{u} = \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ J\mu \left( y_{\eta}^{2} \frac{\partial u}{\partial \xi} - y_{\xi} y_{\eta} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ J\mu \left( y_{\xi}^{2} \frac{\partial u}{\partial \eta} - y_{\xi} y_{\eta} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right]$$

$$+ \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ Jy \mu x_{\eta} \left( y_{\xi} \frac{\partial v}{\partial \eta} - y_{\eta} \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right] + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ Jy \mu x_{\xi} \left( y_{\eta} \frac{\partial v}{\partial \xi} - y_{\xi} \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right]$$

$$- \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \frac{J\mu y_{\eta}}{y} \left( x_{\xi} \frac{\partial (yv)}{\partial \eta} - x_{\eta} \frac{\partial (yv)}{\partial \xi} \right) \right]$$

$$- \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \frac{J\mu y_{\xi}}{y} \left( x_{\eta} \frac{\partial (yv)}{\partial \xi} - x_{\xi} \frac{\partial (yv)}{\partial \eta} \right) \right]$$

$$(4.36)$$

Equação	Φ	$C^{\Phi}$	$\Gamma^{\Phi}$	$P^{\Phi}$
Massa	1	1	0	0
QML axial	и	1	μ	$rac{\partial p}{\partial \eta} y_{m{\xi}} - rac{\partial p}{\partial m{\xi}} y \eta$
QML radial	V	1	μ	$rac{\partial p}{\partial \xi} x \eta - rac{\partial p}{\partial \eta} x \xi$
Energia	Т	<i>c</i> <sub>p</sub>	К	$\frac{1}{J}\frac{\partial p}{\partial t} - u\left(\frac{\partial p}{\partial \eta}y_{\xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi}y_{\eta}\right) - v\left(\frac{\partial p}{\partial \xi}x_{\eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta}x_{\xi}\right)$

Tabela 4.1: Valores dos coeficientes da equação de conservação transformada geral.

$$S^{V} = \frac{1}{3y} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ J\mu y \left( x_{\eta}^{2} \frac{\partial v}{\partial \xi} - x_{\xi} x_{\eta} \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{3y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ J\mu y \left( x_{\xi}^{2} \frac{\partial v}{\partial \eta} - x_{\xi} x_{\eta} \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ J\mu y \eta \left( x_{\xi} \frac{\partial u}{\partial \eta} - x_{\eta} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ J\mu y_{\xi} \left( x_{\eta} \frac{\partial u}{\partial \xi} - x_{\xi} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] \\ - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ J\mu x \eta \left( y_{\xi} \frac{\partial u}{\partial \eta} - y_{\eta} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ J\mu x_{\xi} \left( y_{\eta} \frac{\partial u}{\partial \xi} - y_{\xi} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] \\ - \frac{4\mu v}{3y^{2}J} - \frac{2v}{3y} \left[ \frac{\partial (x_{\xi}\mu)}{\partial \eta} - \frac{\partial (x_{\eta}\mu)}{\partial \xi} \right]$$

$$(4.38)$$

$$S^{T} = 2\mu J \left[ \frac{\partial (y\eta u)}{\partial x} - \frac{\partial (y\xi u)}{\partial y} \right]^{2} + 2\mu J \left[ \frac{\partial (x_{\xi}v)}{\partial y} - \frac{\partial (x_{\eta}v)}{\partial y} \right]^{2} + \frac{2\mu}{z} \left( \frac{v}{z} \right)^{2}$$

$$+ \mu J \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} (vy\eta - ux\eta) + \frac{\partial}{\partial \eta} (ux_{\xi} - vy_{\xi}) \right]^{2} - \frac{2\mu J}{3} \left( \frac{\partial \bar{U}}{\partial \xi} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial \eta} + \frac{v}{yJ} \right)^{2}$$
(4.39)

A discretização das equações de conservação pelo Método de Volumes Finitos é realizada integrando-as sobre um volume de controle arbitrário em relação às coordenadas do domínio transformado ( $\xi - \eta$ ). As expressões resultantes representam o fluxo da propriedade de interesse ou de suas derivadas através das faces do volume de controle.

Funções de interpolação de primeira ordem (UDS) ou de segunda ordem (CDS) com correção adiada são utilizadas para calcular as derivadas de primeira e segunda ordens nas faces de cada volume de controle. Aproximações das derivadas com CDS e UDS são apresentadas nas Eqs. (4.40)-(4.47) e nas Eqs. (4.48)-(4.51), respectivamente.

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_{\rho} \approx \left. \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta \xi} \right. \tag{4.40}$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_{W} \approx \left. \frac{\Phi_P - \Phi_W}{\Delta \xi} \right.$$
(4.41)

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\bigg|_{n} \approx \frac{\Phi_{E} + \Phi_{NE} - \Phi_{W} - \Phi_{NW}}{4\Delta \xi}$$
(4.42)

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \bigg|_{S} \approx \frac{\Phi_{E} + \Phi_{SE} - \Phi_{W} - \Phi_{SW}}{4\Delta \xi}$$
(4.43)

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_{n} \approx \left. \frac{\Phi_{N} - \Phi_{P}}{\Delta \eta} \right. \tag{4.44}$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_{S} \approx \left. \frac{\Phi_P - \Phi_S}{\Delta \eta} \right. \tag{4.45}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta}\Big|_{\rho} \approx \frac{\Phi_N + \Phi_{NE} - \Phi_S - \Phi_{SE}}{4\Delta\eta}$$
(4.46)

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_{W} \approx \left. \frac{\Phi_{N} + \Phi_{NW} - \Phi_{S} - \Phi_{SW}}{4\Delta \eta} \right. \tag{4.47}$$

$$\Phi_{e} \approx \left(\frac{1}{2} + \lambda_{e}\right) \Phi_{P} + \left(\frac{1}{2} - \lambda_{e}\right) \Phi_{E}$$
(4.48)

$$\Phi_W \approx \left(\frac{1}{2} + \lambda_W\right) \Phi_W + \left(\frac{1}{2} - \lambda_W\right) \Phi_P \tag{4.49}$$

$$\Phi_n \approx \left(\frac{1}{2} + \lambda_n\right) \Phi_P + \left(\frac{1}{2} - \lambda_n\right) \Phi_N \tag{4.50}$$

$$\Phi_{S} \approx \left(\frac{1}{2} + \lambda_{S}\right) \Phi_{S} + \left(\frac{1}{2} - \lambda_{S}\right) \Phi_{P}$$
(4.51)

onde  $\Delta \xi$  e  $\Delta \eta$  são o tamanho dos volumes da malha computacional nas direções  $\xi$  e  $\eta$ , respectivamente; e

$$\lambda_e = \frac{1}{2} \operatorname{sign}(\bar{U}_e) \tag{4.52}$$

$$\lambda_W = \frac{1}{2} \operatorname{sign}(\bar{U}_W) \tag{4.53}$$

$$\lambda_n = \frac{1}{2} \operatorname{sign}(\bar{V}_n) \tag{4.54}$$

$$\lambda_{\mathcal{S}} = \frac{1}{2} \operatorname{sign}(\bar{V}_{\mathcal{S}}) \tag{4.55}$$

sendo que *sign*() retorna o sinal do argumento.

Substituindo as expressões (4.40) a (4.51) nas equações discretizadas para cada volume de controle, obtemos um sistema linear para cada equação de conservação, onde cada equação pode ser escrita na forma da Eq. (4.56). O sistema linear resultante da discretização das equações de conservação é resolvido utilizando o método MSI (do inglês, "*Modified Strongly Implicit*") (TANNEHILL; ANDERSON; PLETCHER, 1997).

$$a_{p}\Phi_{P} = a_{W}\Phi_{W} + a_{e}\Phi_{E} + a_{s}\Phi_{S} + a_{n}\Phi_{N} + a_{sw}\Phi_{SW} + a_{nw}\Phi_{NW} + a_{se}\Phi_{SE} + a_{ne}\Phi_{NE} + b_{p}$$
(4.56)

onde *a* representa os coeficientes das equações de conservação discretizadas relacionados ao volume de controle *P* e aos seus vizinhos e  $b_p$  o termo-fonte destas equações.

Das equações de conservação da quantidade de movimento linear, Eqs. (4.6) e (4.7), são obtidas expressões para a determinação das velocidade nodais nas direções axial e radial. Através do uso de uma formulação adequada a qualquer regime de velocidades obtém-se as componentes da velocidade em toda a tubeira, desde a entrada (regime subsônico) até a saída (regime supersônico) (MARCHI; MALISKA, 1994; MALISKA, 2010).

A equação de conservação da massa, Eq. (4.5), é utilizada para a determinação da correção de pressão, obtida através do acoplamento pressão-velocidade, empregando-se o método SIMPLEC (do inglês, "*Semi Implicit Linked Equations Consistent*") para escoamentos a qualquer regime de velocidade (VAN DOORMAAL; RAITHBY, 1984; VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995; MALISKA, 2010). Os cálculos utilizados no Mach2D para a aplicação do SIMPLEC são apresentados com detalhes por Araki (2007).

A temperatura no volume de controle é obtida diretamente da discretização da equação da energia, Eq. (4.8), diferentemente de outros trabalhos em que tal equação é formulada em função da entalpia (LAROCA, 2000). A massa específica é obtida empregando-se a equação de estado, Eq. (4.9).

### 4.4.2 Discretização do Domínio

A discretização do domínio na direção axial (x) foi determinada para a obtenção de uma maior concentração de volumes próximo à garganta. Para isto, o comprimento do volume foi tomado proporcional ao raio local da tubeira. A vantagem desta metodologia é que o comprimento dos volumes é menor próximo à garganta, obtendo-se maior precisão dos resultados nesta região, onde há grande variação das variáveis de interesse.

Para gerar os comprimentos de cada volume na direção axial foi utilizado o algoritmo apresentado na Tab. 4.2. Inicialmente a distribuição das coordenadas  $(x_i)$  são obtidas por uma distribuição uniforme. O algoritmo apresentado utiliza-se do raio local  $(r_i)$  em cada coordenada  $(x_i)$  para gerar um fator de redistribuição dos volumes (w) ao longo de toda a tubeira. O raio local  $(r_i)$  para uma determinada coordenada  $(x_i)$  é obtido pela função *contour* $(x_i)$ .

 Tabela 4.2: Pseudocódigo para discretização na direção axial com concentração de volumes próximo à garganta.

01	Faça $j \leftarrow 1, 100$
02	$w \leftarrow 0.5 \cdot (r(1) + r(n_x + 1))$
03	Faça $i \leftarrow 2, n_x$
02	$w \leftarrow w + r(i)$
07	Fim do faça
02	$w \leftarrow L/w$
03	Faça $i \leftarrow 2, n_x$
04	$d_x \leftarrow w \cdot (r(i-1) + r(i))/2$
05	$x(i) \leftarrow x(i-1) + d_x$
06	$r(i) \leftarrow contour(x(i))$
07	Fim do faça
08	Fim do faça

O algoritmo apresentado na Tab. 4.2 é aplicado inicialmente em toda a tubeira. Após a redimensionalização dos volumes é identificada a face que se encontra mais próxima a coordenada da garganta. A coordenada (x) de tal face é ajustada para ficar exatamente sobre o centro da garganta. Por fim, o algoritmo é aplicado a cada uma das seções da tubeira para redimensionar os volumes em cada uma delas.

Na direção radial foram utilizadas duas metodologias distintas para a simulação dos escoamentos invíscidos e viscosos. Para simular o escoamento invíscido foi utilizada uma distribuição uniforme dos volumes na direção radial, conforme pode-se observar nas Figs. 4.3, 4.4 e 4.5 para algumas das malhas utilizadas no código Mach2D.

Para simular o escoamento viscoso foi implementada uma malha não uniforme para a discretização do domínio na direção radial (y). Tal discretização consiste em distribuir os

vértices dos volumes utilizando-se uma progressão geométrica na vizinhança da parede da tubeira e uniforme no restante do domínio, conforme apresentado nas Figs 4.6, 4.7 e 4.8. A concentração de volumes próximo à parede é necessária para capturar de forma adequada a variação das propriedades de interesse dentro da camada limite.

A Tab. 4.3 apresenta o algoritmo utilizado para determinar o comprimento de cada volume na direção radial. O primeiro passo (linha 2) é recalcular o comprimento na direção radial do volume da fronteira norte (d). Na linha 3 a função *ratio* obtém a razão (Q) de uma progressão geométrica com base no número de termos  $(n_y/2-1)$ , no valor do primeiro termo (d) e na soma de todos os termos  $(r_i)$ . Entre as linhas 4 e 13 são calculados os comprimentos de cada volume na direção radial, utilizando-se a PG próximo ao contorno norte e distribuição linear no restante do domínio.

Tabela 4.3: Pseudocódigo para discretização PG-melhorada na direção radial.

01	Faça $i = 1, n_x + 1$
02	$d = (r(i)/r_g) \cdot a_1$
03	$Q \leftarrow ratio(n_y/2-1,d,r(i))$
04	Faça $j = n_y, 2, -1$
05	$k_p = n_x \cdot (j-1) + i$
06	$k_n = k_p + n_x$
07	$x(k_p) = x(k_n)$
08	Se $(d \cdot Q^{n_y - j - 2} < y(k_n)/j)$ então
09	$y(k_p) = y(k_n) - d \cdot Q^{n_y - j - 2}$
10	Senão
11	$y(k_p) = y(k_n) - y(k_n) / j$
12	Fim do se
13	Fim do faça
14	Fim do faça



Figura 4.3: Malha  $32 \times 16$  com discretização uniforme na direção radial.



Figura 4.4: Malha  $64 \times 32$  com discretização uniforme na direção radial.



Figura 4.5: Malha 128  $\times$  64 com discretização uniforme na direção radial.



Figura 4.6: Malha  $32 \times 20$  com discretização não uniforme na direção radial.



Figura 4.7: Malha  $64 \times 40$  com discretização não uniforme na direção radial.



Figura 4.8: Malha  $128 \times 80$  com discretização não uniforme na direção radial.

# 5 Verificação e Validação

A utilização de códigos numéricos requer uma cuidadosa estratégia para assegurar que os modelos computacionais são apropriados para o fenômeno físico que se deseja simular. Cuidado deve ser tomado para que os modelos sejam aplicados em uma cronologia e de maneira adequada (EBRAHIMI, 1997).

Para que uma simulação computacional alcance por completo seu potencial como uma ferramenta de previsão, deve-se ter confiança que os resultados obtidos representam com acurácia a realidade. Verificação e validação fornecem uma sistemática para construir confiança nas previsões da simulação computacional (ROY, 2005).

Verificação trata com a matemática e aborda a acurácia da solução numérica para um dado modelo, enquanto que a validação trata com a física e aborda a adequação de um modelo em representar o fenômeno físico. Verificação pode ser relacionada a como resolver a equação corretamente, enquanto que validação está relacionada à escolha adequada da equação (ROY, 2005).

# 5.1 Verificação

Podemos separar verificação em dois aspectos fundamentais: verificação do código computacional e verificação da solução numérica. O primeiro consiste em assegurar, dentro do possível, que não existem erros ("*bugs*") ou inconsistências em um código computacional, enquanto que o segundo é o processo de quantificar o erro numérico associado a cada solução numérica (ROY, 2005).

### 5.1.1 Verificação da Solução Numérica

Em dinâmica dos fluidos computacional, ao tratarmos numericamente um modelo matemático utilizamos aproximações, logo, a solução obtida por tal metodologia não é, em

geral, igual à solução analítica do modelo. Portanto, verifica-se a necessidade de realizar estimativas do erro de discretização das soluções numéricas obtidas, a fim de mensurar a qualidade de tais resultados.

A verificação da solução numérica trata com a avaliação do erro que existe quando equações diferenciais parciais são resolvidas numericamente. Existem três principais aspectos para a verificação da solução: verificação de dados de entrada, estimativa do erro numérico da solução e verificação dos dados de saída. O principal destes aspectos é a estimativa de erros numéricos (ROY, 2005).

O erro numérico é causado por diversas fontes de erro, que são: erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação. O processo que quantifica o erro numérico é denominado verificação (MARCHI, 2001). O erro numérico (*E*) é definido, pela ASME (2009), como a diferença entre a solução numérica ( $\phi$ ) e a solução analítica ( $\Phi$ ) de uma variável de interesse, ou seja,

$$E(\phi) = \phi - \Phi \tag{5.1}$$

Em termos práticos, não se conhece a solução analítica do modelo, logo não é possível obter o erro numérico. Em seu lugar, obtemos uma estimativa deste valor, denominada incerteza (U). A incerteza da solução numérica de uma variável de interesse é dada pela diferença entre a solução numérica  $(\phi)$  e a estimativa da solução analítica  $(\phi_{\infty})$ , ou seja,

$$U(\phi) = \phi - \phi_{\infty} \tag{5.2}$$

Com o objetivo de reduzir de forma significativa o erro de iteração, o sistema linear oriundo da discretização do modelo matemático foi resolvido de forma iterativa até atingir o erro de máquina. O erro de arredondamento foi minimizado utilizando-se precisão dupla nas variáveis do tipo real. O erro de programação foi considerado ausente após a aplicação do teste da ordem de acurácia.

Reduzindo de forma significativa ou eliminando os demais tipos de erros, o presente trabalho se concentra apenas no efeito do erro de truncamento sobre as soluções numéricas. Neste caso, o erro numérico passa a ser denominado de erro de discretização (E) (FERZIGER; PERIĆ, 2002). Para estimar a incerteza da solução numérica foram utilizados os estimadores de Richardson (RICHARDSON, 1910), GCI (do inglês, "*Grid Convergence Index*") (ROACHE, 1994) e Convergente (MARCHI, 2001), obtidos pelo código Richardson 4.0.

#### Estimador de Richardson

A incerteza (U) de uma solução numérica ( $\phi$ ) de acordo com o estimador de Richardson, denotada por  $U_{Ri}$ , é calculada através da Eq. (5.2), onde a estimativa da solução analítica ( $\phi_{\infty}$ ) é obtida através da extrapolação de Richardson generalizada (ROACHE, 1994), dada por:

$$\phi_{\infty}(p_L) = \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{q_{21}^{p_L} - 1}$$
(5.3)

sendo  $\phi_1 e \phi_2$  as soluções numéricas obtidas com as malhas fina e grossa, isto é, com malhas cujo tamanho (*h*) dos elementos é  $h_1 e h_2$ , respectivamente, com  $h_1 < h_2$ ;  $p_L$  é a ordem assintótica do erro de discretização; e  $q_{21}$  é a razão de refino entre as malhas fina e grossa, definida por:

$$q_{21} = \frac{h_2}{h_1} \tag{5.4}$$

Em problemas práticos, a obtenção da ordem assintótica  $(p_L)$  pode ser de extrema dificuldade. Para contornar tal situação, a estimativa do erro utilizando o estimador de Richardson pode ser reescrita utilizando a ordem aparente  $(p_U)$  ao invés da ordem assintótica  $(p_L)$ , ou seja,

$$\phi_{\infty}(p_U) = \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{q_{21}^{p_U} - 1}$$
(5.5)

A ordem aparente  $(p_U)$  é definida como a inclinação local da curva de incerteza (U) da solução numérica  $(\phi)$  versus o tamanho (h) dos elementos da malha em um gráfico bilogarítmico (MARCHI, 2001), ou seja,

$$p_U = \frac{\log(\Psi_U)}{\log(q_{21})}$$
 para  $q_{21} = q_{32}$  (5.6)

onde  $q_{32}$  é a razão de refino entre as malhas super-grossa  $(h_3)$  e grossa  $(h_2)$ , dada por:

$$q_{32} = \frac{h_3}{h_2},\tag{5.7}$$

e  $\Psi_U$  é a razão de convergência da solução numérica para a solução analítica, definida por:

$$\Psi_U = \frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2} \tag{5.8}$$

#### **Estimador Convergente**

De acordo com Marchi e Silva (2002), tem-se que a solução analítica ( $\phi$ ), de uma variável de interesse, é limitada pelas estimativas obtidas pelo estimador Richardson baseadas nas ordens assintótica e aparente,  $\phi_{\infty}(p_L)$  e  $\phi_{\infty}(p_U)$ , respectivamente. Baseado nisto, a solução numérica convergente ( $\phi_C$ ) é definida como a média destas estimativas, ou seja,

$$\phi_C = \frac{\phi_\infty(p_L) + \phi_\infty(p_U)}{2}.$$
(5.9)

A incerteza da solução convergente é dada pelo Estimador Convergente  $(U_C)$ , expresso por:

$$U_{C} = \frac{|\phi_{\infty}(p_{L}) - \phi_{\infty}(p_{U})|}{2}.$$
(5.10)

Portanto, a solução numérica com a estimativa de erro numérico é dada por:

$$\phi = \phi_C \pm U_C. \tag{5.11}$$

#### **Estimador GCI**

De acordo com o estimador GCI a incerteza ( $U_{GCI}$ ) da solução numérica  $\phi$  é dada por (ROACHE, 1994):

$$U_{GCI} = F_S \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{q_{21}^p - 1} \tag{5.12}$$

onde  $F_S$  é um fator de segurança com valor igual a 1,25 quando são utilizadas três ou mais malhas (ROACHE, 2011) e p é dado pelo menor valor dentre as ordens assintótica e aparente, ou seja,

$$p = \min\{p_L, p_U\} \tag{5.13}$$

A representação correta da solução numérica ( $\phi_1$ ) e sua respectiva estimativa do erro ( $U_{GCI}$ ) obtida com o estimador GCI é:

$$\phi = \phi_1 \pm U_{GCI} \tag{5.14}$$

A estimativa do erro calculada com a Eq. (5.14) representa uma banda ou um intervalo em torno da solução numérica ( $\phi_1$ ).

### 5.1.2 Verificação do Código Computacional

O mais rigoroso teste para verificação de código computacional é o teste da ordem de acurácia, que determina se o erro de discretização é reduzido na proporção esperada. Este teste é equivalente a determinar se a ordem de acurácia observada corresponde à ordem de acurácia formal. Para o método de volumes finitos, a ordem de acurácia formal é obtida pela análise do erro de truncamento (ROY, 2005).

Embora menos rigoroso que o teste da ordem de acurácia, existem duas outras abordagens que podem ajudar na verificação de um código computacional. A primeira abordagem é o uso de soluções *benchmark*, que tem sido avaliadas ou calculadas com um demonstrado alto grau de acurácia. A segunda abordagem é a comparação dos resultados de um código com os resultados de outro código. Tal abordagem deve ser usada com cautela, dado que um código não pode ser verificado com confiança por comparação com um código não verificado (ROY, 2005).

Considerando que durante toda a revisão bibliográfica não foram encontrados na literatura resultados obtidos por outros códigos e que possam ser utilizados como referência, este tipo de abordagem não foi utilizada neste trabalho. Os únicos trabalhos encontrados com estimativa de erro numérico e obtidos com grande acurácia, foram obtidos com o mesmo código computacional que foi utilizado neste estudo, tornando-se sem sentido a comparação com tais resultados.

### 5.1.3 Simulações Numéricas

O processo de verificação consiste de duas etapas, verificação do código computacional e verificação da solução numérica. Para ambas as etapas foi utilizado um perfil perfeitamente

parabólico, apresentado na Fig. 5.1. Esta tubeira se diferencia da tubeira parabólica tradicional pois a mesma apresenta um perfil convexo (visto do interior do motor-foguete).



Figura 5.1: Perfil da tubeira parabólica utilizada na verificação do código Mach2D.

Deve-se notar, contudo, que o perfil empregado neste trabalho é um perfil didático, semelhante ao apresentado por Fox e McDonald (1998) no estudo de escoamentos supersônicos. A geometria da parede da tubeira é definida pela Eq. 5.15 e os parâmetros físicos e geométricos são apresentados na Tab. 5.1.

$$y = 0.2(x - 0.5)^2 + 0.05$$
(5.15)

Tabela 5 1.	Parâmetros	físicos e	geométricos	utilizados na	verificação	do código	Mach2D
100010 3.1.	1 aramenos	1151005 0	zcometreos	utilizados na	vermeação	uo courgo	mach2D.

	Raio da garganta $(r_g) [m]$	0,05
Do uêve otro o	Raio da tubeira na entrada $(r_{in})$ [m]	0,1
Parametros	Raio da tubeira na saída $(r_{exit}) [m]$	0,1
geometricos	Comprimento da seção convergente $(L_C)$ [m]	0,5
	Comprimento da seção divergente $(L_d)$ [m]	0,5
	Temperatura de estagnação $(T_0)$ [K]	3000
	Pressão de estagnação $(p_0)$ [Pa]	$2 \times 10^{6}$
Donômotros	Razão entre calores específicos $(\gamma)^1$	1,1713
Farametros	Constante do gás (R) $[J/kg \cdot K]^1$	461,51
1181008	Calor específico à pressão constante $(c_p) [J/kg \cdot K]^2$	3155,15
	Condutividade térmica ( $\kappa$ ) [ $W/m \cdot K$ ] <sup>2</sup>	0,40625372
	Viscosidade ( $\mu$ ) [ $Pa \cdot s$ ] <sup>2</sup>	$9{,}6176654 \times 10^{-5}$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Variável prescrita apenas para escoamento monoespécie.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Variável prescrita apenas para escoamento monoespécie com propriedades constantes.

Todas as simulações numéricas utilizadas para a verificação foram executadas em um *cluster* da UTFPR, Câmpus Francisco Beltrão. As características dos computadores que compõem o *cluster* da UTFPR e dos softwares utilizados estão apresentados na Tab. 5.2.

	Processador	Intel(R) Core(TM) i5-2310
Uordworo	Frequência [GHz]	2,90
Haluwale	Arquitetura [bits]	64
	Memória RAM [GB]	8,0
	Processadores	1
	Núcleos	4
	Sistema operacional	Linux
	Distribuição	Debian 7
Software	Kernel	3.2.0-4-amd64
	Compilador	GNU Fortran
	Versão do compilador	4.7.2

Tabela 5.2: Configurações dos computadores do cluster da UTFPR, câmpus Francisco Beltrão.

Para simular o escoamento invíscido, o domínio foi discretizado utilizando-se malhas com até 2048 volumes na direção axial e 1024 volumes na direção radial, enquanto que, para simular o escoamento viscoso foram utilizadas malhas com até 2048 volumes na direção axial e 1280 na direção radial. Tanto para o escoamento invíscido como para o escoamento viscoso foram utilizadas malhas mais grossas para efetuar as estimativas de erro numérico, utilizando-se sempre razão de refino igual a dois.

Para avaliar a qualidade das soluções numéricas obtidas pelo tipo de discretização proposto, apresentado na seção 4.4.2, foram realizadas simulações adicionais com malhas uniformes em ambas as direções para o escoamento invíscido e progressão geométrica na direção radial para o escoamento viscoso. Os tipos de de malhas utilizados para simular o escoamento invíscido são apresentadas nas Figs. 5.2 e 5.3, enquanto que, as malhas utilizadas para simular o escoamento viscoso são apresentadas nas Figs. 5.4 e 5.5.

A verificação da solução numérica e o teste da ordem de acurácia foram realizados sobre o coeficiente de descarga ( $C_d$ ) e o coeficiente de empuxo ( $C_{Fv}$ ). Para estas variáveis foram calculadas as ordens aparente ( $p_U$ ) para todos os modelos matemáticos e comparadas com a ordem assintótica ( $p_L$ ). As estimativas de erro foram calculadas utilizando-se o estimador GCI.



Figura 5.2: Malha  $64 \times 32$  com discretização uniforme nas direções axial e radial.



Figura 5.3: Malha  $64 \times 32$  com discretização concentrada próximo a garganta na direção axial e uniforme na direção radial.



Figura 5.4: Malha 64 × 40 com discretização concentrada próximo a garganta na direção axial e PG na direção radial.



Figura 5.5: Malha  $64 \times 40$  com discretização concentrada próximo a garganta na direção axial e PG-melhorada na direção radial.

Os resultados obtidos para o coeficiente de descarga ( $C_d$ ) e escoamento invíscido, utilizando-se malha uniforme em ambas as direções e malha concentrada na garganta na direção axial e uniforme na direção radial, são apresentados nas Tabs. 5.3 e 5.4, respectivamente. A estimativa do erro numérico é 30% menor quando utiliza-se malha concentrada na garganta ao invés de malha uniforme na direção axial.

Das Tabs. 5.3 e 5.4 pode-se observar que a solução numérica com a respectiva estimativa do erro numérico contém a solução analítica fornecida por Kliegel e Levine (1969), apresentada na Eq. 5.16. Além disto, com o refinamento da malha as ordens aparentes ( $p_U$ ) ficam muito próximas da ordem assintótica ( $p_L = 1$ ) em ambos os tipos de malhas. Tal característica indica que o código Mach2D não possui erro de programação.

$$C_{d} = 1 - \frac{\gamma + 1}{\left(1 + \frac{r_{cgd}}{r_{g}}\right)^{2}} \left[ \frac{1}{96} - \frac{8\gamma - 27}{2304\left(1 + \frac{r_{cgd}}{r_{g}}\right)} + \frac{754\gamma^{2} - 757\gamma + 3633}{276480\left(1 + \frac{r_{cgd}}{r_{g}}\right)^{2}} \right]$$
(5.16)

Tabela 5.3: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes e malha uniforme em ambas as direções [solução analítica: 0,99996927528521751].

$n_x$	$n_y$	h	t <sub>cpu</sub>	$C_d$	$p_U$	U <sub>GCI</sub>
4	2	0,25000000	0:00:00	1,39037	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,12500000	0:00:00	1,18389	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,06250000	0:00:00	1,09724	1,252858	0,10831
32	16	0,03125000	0:00:00	1,04912	0,848215	0,07518
64	32	0,01562500	0:00:04	1,02470	0,978983	0,03143
128	64	0,00781250	0:00:14	1,01239	0,988556	0,01563
256	128	0,00390625	0:02:09	1,00621	0,993006	0,00780
512	256	0,00195312	0:16:35	1,00311	0,995809	0,00390
1024	512	0,00097656	1:54:20	1,00156	0,997515	0,00195
2048	1024	0,00048828	24:08:07	1,00078	0,998509	0,00097

Os resultados obtidos para o coeficiente de empuxo ( $C_{Fv}$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes, utilizando-se malha concentrada na garganta na direção axial e uniforme na direção radial, são apresentados na Tab. 5.5. Para esta variável pode-se observar que a ordem aparente  $(p_U)$  converge para a ordem assintótica  $(p_L = 1)$ .

Tabela 5.4: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes e malha concentrada na garganta na direção axial [solução analítica: 0,99996927528521751].

$n_x$	$n_y$	h	<i>t</i> <sub>cpu</sub>	$C_d$	pu	U <sub>GCI</sub>
4	2	0,25000000	0:00:00	1,29148	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,12500000	0:00:00	1,12283	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,06250000	0:00:00	1,06808	1,623263	0,06843
32	16	0,03125000	0:00:00	1,03495	0,724273	0,06352
64	32	0,01562500	0:00:03	1,01754	0,928458	0,02410
128	64	0,00781250	0:00:19	1,00877	0,989905	0,01111
256	128	0,00390625	0:02:17	1,00439	0,999662	0,00548
512	256	0,00195312	0:16:33	1,00219	1,000450	0,00274
1024	512	0,00097656	1:50:04	1,00110	0,999848	0,00137
2048	1024	0,00048828	27:00:36	1,00055	0,999466	0,00069

Tabela 5.5: Resultados do coeficiente de empuxo ( $C_{Fv}$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes e malha concentrada na garganta na direção axial.

$n_x$	$n_y$	h	t <sub>cpu</sub>	$C_{Fv}$	$p_U$	U <sub>GCI</sub>
4	2	0,25000000	0:00:00	1,67158	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,12500000	0:00:00	1,58775	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,06250000	0:00:00	1,59425	3,690042	0,00812
32	16	0,03125000	0:00:00	1,59571	2,152604	0,00183
64	32	0,01562500	0:00:03	1,59783	-0,539578	—
128	64	0,00781250	0:00:19	1,59968	0,197545	0,01577
256	128	0,00390625	0:02:17	1,60088	0,632981	0,00271
512	256	0,00195312	0:16:33	1,60155	0,823163	0,00110
1024	512	0,00097656	1:50:04	1,60191	0,913497	0,00051
2048	1024	0,00048828	27:00:36	1,60209	0,957445	0,00025

Para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes foram simulados dois tipos de malha, ambos com concentração de volumes próximo à garganta na direção axial. Na direção radial foram utilizadas malhas com distribuição obtida por uma progressão geométrica (PG) da parede até o eixo de simetria. O outro tipo de malha avaliado é dado por uma progressão
128

256

512

1024

80

160

320

640

0,00781250

0,00390625

0,00195312

0,00097656

geométrica próxima à parede e uniforme no restante do domínio, denominada PG-melhorada, conforme apresentado na seção 4.4.2.

Os resultados para o coeficiente de descarga ( $C_d$ ) com as malhas tipo PG e PG-melhorada são apresentados nas Tabs. 5.6 e 5.7, respectivamente. Pelos resultados pode-se observar que a ordem aparente ( $p_U$ ) converge para a ordem assintótica ( $p_L$ ), indicando ausência de erro de programação no código Mach2D em simular o escoamento viscoso.

Tabela 5.6: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento viscoso monoespécie

com propriedades constantes e malha tipo PG na direção radial. h  $C_d$ <sup>U</sup>GCI  $n_x$  $n_{v}$  $a_1$ t<sub>cpu</sub>  $p_U$  $64 \cdot 10^{-5}$ 8 5 0,12500000 0:00:01 1,1219 nao se aplica nao se aplica  $32 \cdot 10^{-5}$ 0,06250000 nao se aplica 16 10 0:00:02 1,0650 nao se aplica  $16 \cdot 10^{-5}$ 32 0,03125000 0:00:09 0,697903 20 1,0300 0,0704  $8 \cdot 10^{-5}$ 64 40 0,01562500 0:00:32 1,0120 0,963572 0,0237

0:03:17

0:19:24

1:33:53

6:48:07

1,0031

0,9988

0,9966

0,9955

1,017985

1,014697

1,008295

1,004000

0,0111

0,0055

0,0027

0.0014

 $4 \cdot 10^{-5}$ 

 $2 \cdot 10^{-5}$ 

 $1 \cdot 10^{-5}$ 

 $5 \cdot 10^{-6}$ 

Tabela 5.7: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento viscoso monoespécie

com pro	com propriedades constantes e malha tipo PG-melhorada.							
$n_x$	$n_y$	h	$a_1$	<i>t<sub>cpu</sub></i>	$C_d$	$p_U$	U <sub>GCI</sub>	
8	5	0,12500000	$64 \cdot 10^{-5}$	0:00:01	1,12043	nao se aplica	nao se aplica	
16	10	0,06250000	$32 \cdot 10^{-5}$	0:00:03	1,06454	nao se aplica	nao se aplica	
32	20	0,03125000	$16 \cdot 10^{-5}$	0:00:11	1,02998	0,693743	0,06995	
64	40	0,01562500	$8 \cdot 10^{-5}$	0:00:32	1,01207	0,947928	0,02410	
128	80	0,00781250	$4 \cdot 10^{-5}$	0:03:16	1,00317	1,009258	0,01112	
256	160	0,00390625	$2 \cdot 10^{-5}$	0:17:41	0,99876	1,013375	0,00551	
512	320	0,00195312	$1 \cdot 10^{-5}$	1:27:41	0,99657	1,008190	0,00274	
1024	640	0,00097656	$5 \cdot 10^{-6}$	7:59:48	0,99548	1,003729	0,00137	
2048	1280	0,00048828	$25 \cdot 10^{-7}$	116:49:02	0,99493	1,001086	0,00068	

Pelos resultados apresentados nas Tabs. 5.6 e 5.7 pode-se observar que as soluções obtidas com malhas PG e PG-melhorada fornecem praticamente a mesma precisão. Com base

nestes resultados e no fato da malha PG-melhorada apresentar maior robustez na convergência, optou-se por utilizá-la nas demais simulações do escoamento viscoso.

Nas Tabs. 5.8 e 5.9 são apresentados os resultados obtidos para o coeficiente de descarga com escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis e multiespécie congelado, respectivamente. Ambos os resultados foram obtidos com malhas concentradas na garganta da direção axial e uniforme na direção radial.

h  $C_d$  $p_U$ <sup>U</sup>GCI  $n_x$  $n_{v}$  $t_{cpu}$ 4 2 nao se aplica 0,25000000 0:00:00 1,29259 nao se aplica 8 0,12500000 4 0:00:00 1,12388 nao se aplica nao se aplica 16 0,06250000 0:00:00 1,06893 0,06869 8 1,618226 32 16 0,03125000 0:00:01 1.03565 0,723590 0,06387 64 32 0,01562500 0:00:04 1,01816 0,928385 0,02420 0:00:18 0,01116 128 0,00781250 1,00936 0,989925 64 256 128 0,00390625 0:02:20 1,00495 0,999679 0,00551 512 256 0,00195312 0:16:15 1,00275 1,000459 0,00275 1024 512 0,00097656 1:52:10 1,00165 0,999853 0,00138 1024 0,00048828 1,00110 0,999468 0,00069 2048 29:30:50

Tabela 5.8: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis e malha concentrada na garganta na direção axial.

Tabela 5.9: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido congelado e malha com concentração na garganta na direção axial.

$n_x$	$n_y$	h	t <sub>cpu</sub>	$C_d$	$p_U$	U <sub>GCI</sub>
4	2	0,25000000	0:00:00	1,28912	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,12500000	0:00:00	1,12321	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,06250000	0:00:01	1,06874	1,606930	0,06809
32	16	0,03125000	0:00:03	1,03559	0,716663	0,06440
64	32	0,01562500	0:00:14	1,01814	0,925592	0,02425
128	64	0,00781250	0:01:13	1,00935	0,988710	0,01117
256	128	0,00390625	0:08:04	1,00495	0,999010	0,00551
512	256	0,00195312	0:33:30	1,00275	1,000048	0,00275
1024	512	0,00097656	2:21:59	1,00165	0,999591	0,00138
2048	1024	0,00048828	35:41:03	1,00110	0,999300	0,00069

Pelas Tabs. 5.8 e 5.9 pode-se observar que, para os escoamentos monoespécie com propriedades variáveis e multiespécie congelado, com o refinamento da malha, a ordem aparente  $(p_U)$  apresenta valores muito próximos da ordem assintótica  $(p_L = 1)$ , indicando a ausência de erros de programação. As pequenas diferenças entre as ordens aparente e assintórica para malhas muito finas (1024 × 512 e 2048 × 1024) podem ter aparecido devido ao erro de arredondamento contido nas soluções numéricas.

#### 5.2 Benchmarks

Apesar de uma grande quantidade de estudos terem sido realizados ao longo dos últimos anos sobre o escoamento no interior de tubeiras, existe uma carência de trabalhos que apresentem resultados computacionais de referência (*benchmarks*) que possuam alto grau de acurácia. Os resultados apresentados nesta seção visam suprir tal carência, fornecendo resultados que possam ser utilizados na verificação de outros códigos computacionais.

Para gerar resultados de referência foram avaliadas diversas variáveis de interesse no projeto de tubeiras de motores-foguete. A solução convergente ( $\phi_C$ ) com o respectivo estimador ( $U_C$ ) foi utilizada para gerar uma solução extrapolada com maior acurácia do que a solução numérica fornecida pelo Mach2D.

A geometria da tubeira e os dados de entrada considerados nesta etapa são os mesmos utilizados na verificação do código Mach2D (Fig. 5.1 e Tab. 5.1). Para simular o escoamento invíscido foram utilizadas malhas com distribuição de volumes concentrada na garganta na direção axial e uniforme na direção radial. O escoamento viscoso foi simulado utilizando-se malhas com concentração de volumes na garganta na direção axial e PG-melhorada na direção radial. A escolha destas malhas foi baseada na qualidade dos resultados numéricos obtidos na verificação do Mach2D.

As Tabs. 5.10 a 5.13 apresentam os resultados numéricos ( $\phi$ ) e extrapolados ( $\phi_{\infty}$ ) para o coeficiente de descarga, coeficiente de empuxo, impulso específico no vácuo e empuxo, respectivamente. Os resultados apresentados nestas tabelas foram obtidos para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes. Resultados adicionais para os escoamentos invíscidos e viscosos, monoespécie com propriedades variáveis e congelado, são apresentados no Apêndice A.

$n_x$	$n_y$	h	$C_d$	$p_U$	$C_{d\infty}$	U <sub>C</sub>
4	2	0,25000000	1,29148105	nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,12500000	1,12282864	nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,06250000	1,06808400	1,623263	1,02755641	0,01421705
32	16	0,03125000	1,03494698	0,724273	0,99296929	0,00884065
64	32	0,01562500	1,01753613	0,928458	0,99919273	0,00093256
128	64	0,00781250	1,00876959	0,989905	0,99994105	0,00006199
256	128	0,00390625	1,00438528	0,999662	0,999999996	0,00000103
512	256	0,00195312	1,00219382	1,000450	1,00000303	0,0000068
1024	512	0,00097656	1,00109797	0,999848	1,00000200	0,0000012
2048	1024	0,00048828	1,00054984	0,999466	1,00000151	0,0000020

Tabela 5.10: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.

Tabela 5.11: Resultados do coeficiente de empuxo ( $C_{Fv}$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.

$n_x$	$n_y$	h	$C_{Fv}$	$p_U$	$C_{Fv\infty}$	$U_{C}$
4	2	0,25000000	1,6715783	nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,12500000	1,5877516	nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,06250000	1,5942464	3,690042	1,5977666	0,0029747
32	16	0,03125000	1,5957072	2,152604	1,5966494	0,0005184
64	32	0,01562500	1,5978304	-0,539578	—	—
128	64	0,00781250	1,5996819	0,197545	1,6069164	0,0053829
256	128	0,00390625	1,6008759	0,632981	1,6025568	0,0004869
512	256	0,00195312	1,6015507	0,823163	1,6023267	0,0001012
1024	512	0,00097656	1,6019090	0,913497	1,6022908	0,0000236
2048	1024	0,00048828	1,6020935	0,957445	1,6022837	0,0000057

$n_{\chi}$	$n_y$	h	$I_s$	PU	$I_{s\infty}$	U <sub>C</sub>
4	2	0,25000000	241,5611	nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,12500000	263,9109	nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,06250000	278,5726	0,608218	299,8835	6,6493
32	16	0,03125000	287,7554	0,675044	300,0421	3,1040
64	32	0,01562500	293,0685	0,789361	299,3727	0,9910
128	64	0,00781250	295,9579	0,878791	299,1249	0,2776
256	128	0,00390625	297,4717	0,932642	299,0614	0,0760
512	256	0,00195312	298,2478	0,963747	299,0443	0,0203
1024	512	0,00097656	298,6411	0,980813	299,0397	0,0053
2048	1024	0,00048828	298,8391	0,989882	299,0385	0,0014

Tabela 5.12: Resultados do impulso específico no vácuo  $(I_s)$  para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.

Tabela 5.13: Resultados do empuxo (F) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.

$n_x$	$n_y$	h	F	$p_U$	$F_{\infty}$	U <sub>C</sub>
4	2	0,25000000	23073,871	nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,12500000	21757,125	nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,06250000	21859,145	3,690042	21914,440	46,726
32	16	0,03125000	21882,091	2,152604	21896,892	8,144
64	32	0,01562500	21915,442	-0,539578	—	_
128	64	0,00781250	21944,526	0,197545	22058,165	84,555
256	128	0,00390625	21963,281	0,632981	21989,684	7,649
512	256	0,00195312	21973,881	0,823163	21986,071	1,590
1024	512	0,00097656	21979,508	0,913497	21985,507	0,371
2048	1024	0,00048828	21982,406	0,957445	21985,394	0,089

# 5.3 Validação

Antes da utilização de um modelo numérico na previsão de resultados, é necessário estabelecer a confiabilidade dos resultados obtidos pelo modelo matemático. Isto é realizado através de uma série de exercícios de validação, onde os resultados dos cálculos são comparados com dados experimentais bem caracterizados (EBRAHIMI, 1997).

A aplicação de um esquema computacional para prever as condições do escoamento no interior da tubeira é somente justificada se os resultados obtidos possuem concordância qualitativa e quantitativa com tendências observadas e evidências experimentais (SCHLEY; HAGEMANN; KRULLE, 1997). A validação somente fornece confiabilidade aos resultados computacionais se os dados experimentais possuem análise de erros.

A etapa de validação envolve dois esforços: a seleção de um conjunto de dados apropriado para a validação do modelo matemático e a posterior comparação dos dados experimentais com os obtidos pelo modelo. No processo de selecionar e validar um modelo, é necessário identificar um conjunto de dados experimentais apropriados para a avaliação das aproximações físicas incluídas no modelo (EBRAHIMI, 1997).

#### 5.3.1 Resultados Experimentais

Uma extensa revisão bibliográfica foi realizada para selecionar resultados experimentais com documentação suficiente sobre a geometria e as condições de fluxo para o modelo experimental. Infelizmente, a grande maioria dos trabalhos não apresenta os valores dos principais parâmetros analisados em tabelas, limitando-se à representação gráfica. Tal representação dificulta a extração dos resultados de forma precisa. Outra limitação encontrada é a apresentação dos resultados sem análise de incertezas.

Para realizar a validação dos resultados computacionais foram utilizados os resultados experimentais obtidos por Back, Massier e Gier (1965). Com o objetivo de avaliar a incerteza inerente à extração dos dados experimentais do gráfico apresentado por Back, Massier e Gier (1965), foram realizadas várias leituras utilizando o software "G3Data Graph Analyzer" (versão 1.5.3).

Na Tab. 5.14 são apresentados os valores lidos das medidas experimentais do coeficiente de descarga apresentados por Back, Massier e Gier (1965). Não é apresentado no artigo estimativa para a incerteza desta variável. Utilizando como resposta a média aritmética dos valores da tabela e como incerteza o dobro do desvio padrão temos que o coeficiente de descarga é  $C_d = 0,9770 \pm 0,0051$ . Tal incerteza considera o erro experimental e o erro da leitura dos dados do gráfico. Nas Tabs. B.1 e B.2 do apêndice B são apresentados os resultados das leituras das coordenadas (x) e da pressão na parede da tubeira ( $p_{wall}$ ).

Na Tab. 5.15 são apresentados os resultados para as coordenadas dos pontos e as pressões experimentais com as respectivas incertezas. A incerteza inerente à leitura dos dados é definida como o dobro do desvio padrão. Observa-se que a incerteza inerente à leitura das coordenadas

do gráfico é superior a 1% apenas nos três primeiros pontos experimentais, enquanto que, a incerteza na leitura da pressão é superior a 1,5% apenas nos pontos 12, 18 e 20. Apenas no ponto 20 a incerteza é superior a 2%.

Tabela 5.14: Medidas experimentais do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) [Fonte: Back, Massier e Gier (1965)].

ponto	medida 1	medida 2	medida 3
1	0,979950	0,973905	0,979164
2	0,978301	0,977751	0,977339
3	0,973905	0,979401	0,973688

Tabela 5.15: Pressões para cada coordenada com respectivas incertezas relacionadas à extração dos dados experimentais do gráfico do artigo de Back, Massier e Gier (1965).

ponto	coordenada x (m)	incerteza (%)	pressão p (Pa)	incerteza (%)
1	$0,020330 \pm 0,000307$	1,511	$1725679 \pm 2230$	0,129
2	$0,\!025730\pm0,\!000303$	1,177	$1723093 \pm 2010$	0,117
3	$0,\!030088 \pm 0,\!000328$	1,089	$1720450 \pm 1877$	0,109
4	$0,\!035284 \pm 0,\!000236$	0,669	$1715007 \pm 2841$	0,166
5	$0,\!044344\pm0,\!000260$	0,586	$1706988 \pm 3590$	0,210
6	$0,\!049020 \pm 0,\!000237$	0,483	$1681402 \pm 2975$	0,177
7	$0,\!052987 \pm 0,\!000213$	0,401	$1641063 \pm 4222$	0,257
8	$0,\!057055 \pm 0,\!000421$	0,738	$1480069 \pm 10059$	0,680
9	$0,062195 \pm 0,000053$	0,085	$917106 \pm 0037$	0,440
10	$0,062544 \pm 0,000033$	0,053	$843280 \pm 3123$	0,370
11	$0,067103 \pm 0,000297$	0,442	$416088\pm3919$	0,942
12	$0,068008 \pm 0,000142$	0,209	$381127 \pm 6805$	1,785
13	$0,\!071367 \pm 0,\!000057$	0,080	$338061 \pm 4127$	1,221
14	$0,\!078940 \pm 0,\!000132$	0,167	$319421\pm1963$	0,614
15	$0,\!091799 \pm 0,\!000080$	0,087	$219190 \pm 1368$	0,624
16	$0,\!100407\pm 0,\!000122$	0,121	$164990 \pm 2238$	1,357
17	$0,\!116914\pm\!0,\!000158$	0,135	$104524 \pm 1365$	1,306
18	$0,\!134001\pm0,\!000068$	0,051	$61169\pm1031$	1,685
19	$0,\!152117\pm\!0,\!000168$	0,111	$37955 \pm 0284$	0,749
20	$0,169309 \pm 0,000058$	0,034	$26520\pm1606$	6,056

Conforme Back, Massier e Gier (1965), o erro estimado da pressão estática em toda a região divergente, na garganta e na maior parte da região convergente é inferior a 1%. Apenas na entrada da tubeira a incerteza experimental estimada é de 5%.

#### 5.3.2 Resultados Numéricos

Na validação do código computacional Mach2D foi considerado o escoamento de ar atmosférico. As simulações para este caso foram realizadas pelo modelo monoespécie e as propriedades físico-químicas do fluido ( $c_p$ ,  $\kappa \in \mu$ ) foram determinadas por interpolação linear dos dados experimentais apresentados por Incropera e DeWitt (1998) (Anexo D).

Para avaliar a concordância entre os resultados numéricos obtidos pelo código Mach2D e os dados experimentais, foram utilizados os resultados experimentais obtidos por Back, Massier e Gier (1965). Para tanto, foi simulado o escoamento em uma tubeira cônica, conforme apresentado na Fig. 5.6, cujo perfil de pressão foi comparado com os resultados experimentais. O gás (ar) é considerado um fluido perfeito monoespécie e os parâmetros gerais são apresentados na Tab. 5.16.



Figura 5.6: Perfil da tubeira utilizada na validação do Mach2D [Fonte: Back, Massier e Gier (1965)].

Nas Tabs. 5.17 a 5.19 são apresentados, respectivamente, os resultados numéricos obtidos para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes, invíscido monoespécie com propriedades variáveis e viscoso monoespécie com propriedades constantes. Pela Tab. 5.17 pode-se observar que o coeficiente de descarga calculado numericamente converge para a solução analítica com o refinamento da malha.

140014 51	ro. ratalieuros listeos e geometricos atilizados na valtação	de midelize.
	Raio da garganta $(rg) [m]$	0,02032
	Raio de curvatura na entrada da tubeira $(r_{cin})$ [m]	0,02032
	Raio de curvatura na seção convergente da garganta $(r_{cgc})$ [	<i>m</i> ] 0,0127
Parâmetros	Raio de curvatura na seção divergente da garganta $(r_{cgd})$ [m	0,01275
geométricos	Inclinação da parede da seção convergente $(I_c)$ [graus]	44,86445927
	Inclinação da parede da seção divergente $(I_d)$ [graus]	15,114700885
	Comprimento da câmara de combustão $(L_{ch})$ $[m]$	0,007874
	Comprimento da seção convergente $(L_C)$ [m]	0,056998
	Comprimento da seção divergente $(L_d)$ [m]	0,120167
	Temperatura de estagnação $(T_0)$ [K]	833,333333
	Pressão de estagnação $(p_0)$ [Pa]	$1,725068\times10^{6}$
Danâmatuaa	Razão entre calores específicos $(\gamma)^1$	1,35
faires	Constante do gás (R) $[J/kg \cdot K]^1$	287
tisicos	Calor específico à pressão constante ( $c_p$ ) $[J/kg \cdot K]^2$	1106,3326
	Condutividade térmica ( $\kappa$ ) [ $W/m \cdot K$ ] <sup>2</sup>	0,05883318
	Viscosidade ( $\mu$ ) [ $Pa \cdot s$ ] <sup>2</sup>	$3,794657 \times 10^{-5}$

Tabela 5.16: Parâmetros físicos e geométricos utilizados na validação do Mach2D.

Tabela 5.17: Solução numérica do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.

$n_x$	ny	h	$C_d$	$p_U$	U <sub>GCI</sub>	$C_{d\infty}$	U <sub>C</sub>
4	2	0,04625975	1,3171575		nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
8	4	0,02312988	1,3211362		nao se aplica	nao se aplica	nao se aplica
16	8	0,01156494	1,1199184	-5,660	—	—	_
32	16	0,00578247	1,0438943	1,404	0,0950302	0,9827993	0,0149292
64	32	0,00289123	1,0133829	1,317	0,0381392	0,9878999	0,0050284
128	64	0,00144562	0,9988500	1,070	0,0181661	0,9849745	0,0006574
256	128	0,00072281	0,9907360	0,841	0,0128207	0,9815508	0,0010713
512	256	0,00036140	0,9862948	0,869	0,0067130	0,9813890	0,0004646
1024	512	0,00018070	0,9840252	0,968	0,0029652	0,9817043	0,0000513
2048	1024	0,00009035	0,9828858	0,994	0,0014358	0,9817418	0,0000046

<sup>1</sup>Variável prescrita apenas para escoamento monoespécie.

<sup>2</sup>Variável prescrita apenas para escoamento monoespécie com propriedades constantes.

$n_x$	$n_y$	h	$C_d$	$p_U$	U <sub>GCI</sub>	$C_{d\infty}$	$U_C$
4	2	0,04625975	1,3190416		não se aplica	não se aplica	não se aplica
8	4	0,02312988	1,3246368		não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	8	0,01156494	1,1228093	-5,173	_	—	_
32	16	0,00578247	1,0464479	1,402	0,0954517	0,9850297	0,0149431
64	32	0,00289123	1,0157006	1,312	0,0384341	0,9899640	0,0050107
128	64	0,00144562	1,0009926	1,064	0,0183850	0,9868950	0,0006104
256	128	0,00072281	0,9927620	0,838	0,0130733	0,9834173	0,0011140
512	256	0,00036140	0,9882519	0,868	0,0068339	0,9832633	0,0004785
1024	512	0,00018070	0,9859459	0,968	0,0030157	0,9835866	0,0000533
2048	1024	0,00009035	0,9847880	0,994	0,0014598	0,9836251	0,0000050

Tabela 5.18: Solução numérica do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis.

Pela Tab. 5.19 pode-se observar que a diferença entre o resultado numérico ( $C_d = 0.9816 \pm 0.0015$ ) obtido para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes e o resultado experimental ( $C_d = 0.9770 \pm 0.0051$ ) apresentado na literatura é de apenas 0.46%. Tal valor é inferior à soma das incertezas experimental (0.52%) e numérica (0.15%). Quando a solução experimental é comparada ao resultado numérico do escoamento invíscido com propriedades constantes a diferença é um pouco maior do que a soma das incertezas experimental e numérica.

$n_x$	$n_y$	h	$C_d$	$p_U$	U <sub>GCI</sub>	$C_{d\infty}$	$U_C$
8	5	0,02312988	1,2842160		não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	10	0,01156494	1,1106944	_	não se aplica	não se aplica	não se aplica
32	20	0,00578247	1,0431037	1,360	0,0844883	0,9877449	0,0122318
64	40	0,00289123	1,0139559	1,213	0,0364349	0,9883317	0,0035238
128	80	0,00144562	0,9985681	0,922	0,0215097	0,9822704	0,0009100
256	160	0,00072281	0,9897519	0,804	0,0147850	0,9794298	0,0015058
512	320	0,00036140	0,9850698	0,913	0,0066284	0,9800773	0,0003103
1024	640	0,00018070	0,9827199	0,995	0,0029594	0,9803612	0,000089
2048	1280	0,00009035	0,9815542	1,011	0,0014571	0,9803977	0,0000091

Tabela 5.19: Solução numérica do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.

A Tab. 5.20 apresenta um resumo de todos os valores de pressão na parede

obtidos experimentalmente e numericamente para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constante. Por esta tabela pode-se observar que a maioria dos resultados numéricos coincidem com os experimentais quando são consideradas as respectivas margens de incerteza.

As soluções numéricas obtidas pelo código Mach2D para a pressão na parede  $(p_{wall})$  para o escoamento monoespécie possuem bom ajuste com os dados experimentais disponíveis na literatura, conforme pode ser observado na Fig. 5.7. Nas figuras 5.8 à 5.10 são apresentados as distribuições do número de Mach (*M*), da pressão (*p*) e temperatura (*T*), em todo o domínio da tubeira. Tais resultados foram obtidos na simulação do escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes e malha de 2048 × 1024 com concentração de volumes na garganta na direção axial e distribuição uniforme na direção radial.

Tabela 5.20: Resultados experimentais da pressão na parede  $(p_{wall})$  e numéricos para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.

ponto	coordenada $x(m)$	$p_{wall}$ experimental (Pa)	$p_{wall}$ numérica (Pa)
1	$0,\!020330\pm0,\!000307$	$1725679 \pm 88513$	$1723606 \pm$
2	$0,\!025730 \pm 0,\!000303$	$1723093 \pm 88164$	$1721458 \pm 5$
3	$0,\!030088 \pm 0,\!000328$	$1720450 \pm 87899$	$1718973 \pm 11$
4	$0,\!035284 \pm 0,\!000236$	$1715007 \pm 88591$	$1714321 \pm 16$
5	$0,\!044344\pm 0,\!000260$	$1706988 \pm 20660$	$1694889 \pm 40$
6	$0,\!049020 \pm 0,\!000237$	$1681402 \pm 19789$	$1668315 \pm 90$
7	$0,\!052987 \pm 0,\!000213$	$1641063 \pm 20633$	$1614574 \pm 335$
8	$0,\!057055 \pm 0,\!000421$	$1480069 \pm 24860$	$1371040 \pm 2421$
9	$0,\!062195\pm0,\!000053$	$917106 \pm 13208$	$870176 \pm 377$
10	$0,\!062544\pm\!0,\!000033$	$843280 \pm 11555$	$835372 \pm 388$
11	$0,\!067103 \pm 0,\!000297$	$416088\pm8080$	$414076\pm158$
12	$0,\!068008 \pm 0,\!000142$	$381127 \pm 10616$	$343775 \pm 1886$
13	$0,\!071367 \pm 0,\!000057$	$338061 \pm 7508$	$338003 \pm 1583$
14	$0,\!078940 \pm 0,\!000132$	$319421 \pm 5157$	$308335\pm540$
15	$0,\!091799 \pm 0,\!000080$	$219190 \pm 3560$	$219896 \pm 210$
16	$0,\!100407\pm\!0,\!000122$	$164990 \pm 3888$	$169814 \pm 263$
17	$0,\!116914\pm\!0,\!000158$	$104524 \pm 2410$	$104768 \pm 324$
18	$0,\!134001\pm0,\!000068$	$61169 \pm 1642$	$66769 \pm 297$
19	$0,\!152117 \pm 0,\!000168$	$37955\pm 664$	$43957\pm242$
20	$0,169309 \pm 0,000058$	$26520 \pm 1871$	$31077 \pm 194$



Figura 5.7: Comparação entre os resultados experimentais da pressão na parede e as soluções analítica unidimensional e numérica para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades constantes.



Figura 5.8: Curvas de nível do número de Mach (M) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.



Figura 5.9: Curvas de nível da pressão (p em Pa) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.



Figura 5.10: Curvas de nível da temperatura (T em K) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes.

# 6 Otimização

Três tipos de tubeiras (cônica, parabólica e sino) foram considerados na otimização. A diferença entre as geometrias das tubeiras é restrita à seção divergente. A seção convergente foi mantida a mesma para todos os tipos de perfis divergentes. O perfil da seção convergente é similar ao perfil apresentado por Back, Massier e Gier (1965), com raio de curvatura na seção convergente da garganta ( $r_{cgc}$ ) e raio de curvatura na entrada da tubeira ( $r_{cin}$ ) iguais a 0,05*m* e inclinação da parede igual a 30<sup>o</sup>, conforme apresentado na Fig. 6.1.



Figura 6.1: Perfil da seção convergente utilizada em todas as tubeiras otimizadas.

O desempenho de cada geometria foi definido pelo coeficiente de empuxo ( $C_{Fv}$ ), que foi obtido pela solução do escoamento no interior da tubeira. O desempenho das tubeiras otimizadas foi comparado com tubeiras cônicas, uma com inclinação de 15<sup>0</sup> e outra com a mesma razão de expansão ( $\varepsilon$ ).

A otimização da geometria das tubeiras foi realizada pelo DEPP, utilizando-se 50 gerações e populações com tamanho igual a dez vezes o número de incógnitas. O número de *threads* foi tomado igual ao tamanho da população. A constante de diferenciação e a probabilidade de mutação foram tomadas iguais a 0,85 e 0,5, respectivamente. O Método de Superfície de Resposta (RSM) foi aplicado para aceleração da convergência.

As otimizações das tubeiras cônicas e parabólicas foram realizadas no cluster da UTFPR,

câmpus Francisco Beltrão. Todos os computadores que compõem este cluster possuem configuração igual a apresentada na Tab. 5.2. Para a otimização das tubeiras sino foram utilizados os computadores do CENAPAD-UFC (Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho da Universidade Federal do Ceará). As configurações destes computadores são apresentadas na Tab. 6.1

	Processador	Intel Westmere X5650 EP
Uardwara	Frequência [GHz]	2,66
Haluwale	Arquitetura [bits]	64
	Memória RAM [GB]	24
	Sistema operacional	Linux
	Distribuição	Red Hat EL 5
Software	Kernel	2.6.18-128.1.6.el5.Bull.7
	Compilador	GNU Fortran
	Versão do compilador	4.1.2

Tabela 6.1: Configurações dos computadores do CENAPAD-UFC.

#### 6.1 Casos Abordados

Para cada um dos três perfis da tubeira, quatro diferentes modelos matemáticos foram utilizados para simular o escoamento, com o objetivo de avaliar a influência de simplificações matemáticas sobre a geometria ótima da tubeira. Para as equações de Euler foram considerados os modelos de escoamento monoespécie e congelado. Estes mesmos modelos foram considerados para as equações de Navier-Stokes.

Diferentes condições de operação foram consideradas para avaliar a influência sobre a geometria ótima da tubeira. Para avaliar a influência da pressão de estagnação foram consideradas pressões iguais a 1, 2 e 5*MPa*, enquanto que temperaturas de estagnação de 1000, 2000 e 3000K foram avaliadas.

Nove diferentes dimensões de tubeiras foram consideradas na otimização, dadas por tubeiras com três diferentes raios na garganta (0,03, 0,05 e 0,07m), raios de curvatura na seção divergente da garganta (0,01, 0,03 e 0,05m) e três comprimentos para a seção divergente da tubeira (0,6, 0,8 e 1,0m).

Duas condições de contorno diferentes foram consideradas na parede, condição de adiabaticidade e de parede com refrigeração. Está última, foi simulada prescrevendo a

temperatura da parede  $(T_{wall})$  igual a 300K. A Tab. 6.2 apresenta um resumo dos casos considerados neste trabalho.

Tabela 6.2: Resumo das características geométricas e físico-químicas consideradas nas otimizações das tubeiras.

Caso	M. Mat.	M. Físico	$r_{g}(m)$	$r_{cgd}\left(m\right)$	$L_{d}(m)$	C. C. Norte	$p_0(MPa)$	$T_0(K)$
C01	Euler	Mono cte	0,05	0,05	1,0	Adiabática	2	3000
C02	Euler	Mono var	0,05	0,05	1,0	Adiabática	2	3000
C03	Euler	Congelado	0,05	0,05	1,0	Adiabática	2	3000
C04	Euler	Mono cte	0,05	0,05	1,0	Adiabática	2	1000
C05	Euler	Mono cte	0,05	0,05	1,0	Adiabática	2	2000
C06	Euler	Mono cte	0,05	0,05	1,0	Adiabática	1	3000
C07	Euler	Mono cte	0,05	0,05	1,0	Adiabática	5	3000
C08	Euler	Mono cte	0,03	0,05	1,0	Adiabática	2	3000
C09	Euler	Mono cte	0,07	0,05	1,0	Adiabática	2	3000
C10	Euler	Mono cte	0,05	0,05	0,6	Adiabática	2	3000
C11	Euler	Mono cte	0,05	0,05	0,8	Adiabática	2	3000
C12	N-S	Mono cte	0,05	0,05	1,0	Adiabática	2	3000
C14	N-S	Congelado	0,05	0,05	1,0	Adiabática	2	3000
C15	N-S	Mono cte	0,05	0,05	1,0	Dirichlet	2	3000
C16	Euler	Mono cte	0,05	0,01	$1,\!0$	Adiabática	2	3000
C17	Euler	Mono cte	0,05	0,03	1,0	Adiabática	2	3000

O desempenho das tubeiras otimizadas também foi comparado com o coeficiente de empuxo de uma tubeira ideal ( $C_{Fvi}$ ). Ressalta-se que o coeficiente de empuxo ideal é obtido para uma tubeira teórica idealizada, de comprimento e razão de expansão infinitos. Para pressão ambiente nula, o coeficiente de empuxo ideal é dado por (RAO, 1958):

$$C_{Fvi} = \gamma \left(\frac{\gamma+1}{2}\right)^{\frac{-\gamma}{\gamma-1}} \sqrt{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}$$
(6.1)

Para os casos C04 e C05 os valores do coeficiente de empuxo ideal são iguais a 2,07527647 e 2,28104725, respectivamente. Para os demais casos o valor do coeficiente de empuxo ideal é 2,37745643.

# 6.2 Otimização de Tubeiras Cônicas

A seção convergente da tubeira cônica foi definida pela geometria apresentada na Fig. 6.1. O arco de circunferência da garganta é estendido até a intersecção desta com uma reta que define a parede da seção divergente, conforme apresentado na figura 6.2. O objetivo para este tipo de tubeira é a otimização da inclinação da parede ( $I_d$ ).



Figura 6.2: Geometria da tubeira cônica otimizada.

A otimização da inclinação foi realizada sobre o intervalo entre 10 e 30<sup>o</sup>. O coeficiente de empuxo das tubeiras otimizadas foi comparado com o de tubeiras cônicas de 15<sup>o</sup>, apresentados na Tab. 6.3. Nesta tabela, o desempenho de cada tubeira é apresentado com a incerteza numérica determinada pelo estimador de Richardson.

Pela Tab. 6.3 pode-se observar que todas as tubeiras cônicas otimizadas obtiveram coeficiente de empuxo no mínimo 0,5% superior ao de tubeiras cônicas de 15<sup>o</sup>. Na maioria dos casos o ganho foi superior a 1%, chegando a 2,46% no caso C10. Destaca-se que os casos C06 e C07 não apresentam diferença na inclinação ótima quando comparados ao caso C01, indicando que a pressão de estagnação não influencia a geometria ótima da tubeira cônica.

O desempenho de todas as tubeiras cônicas otimizadas ficou acima de 76,8% do desempenho da tubeira ideal. O melhor desempenho nesta comparação ficou com o caso C04, com 86,4%, onde foi utilizada a menor temperatura de estagnação. Na comparação com a tubeira ideal, o desempenho médio das tubeiras cônicas ficou em torno de 80%.

Na comparação entre os casos C01, C02 e C03 pode-se observar que a escolha do modelo físico influencia de forma significativa a geometria ótima das tubeiras. A escolha do modelo matemático também influencia a configuração ótima, como pode ser visualizado na comparação entre os casos C01, C03, C12 e C14. A relação entre a inclinação e o desempenho das tubeiras cônicas para escoamentos invíscidos e viscosos é apresentada na Fig. 6.3.

Casa		Côni	ca otimizada		Cônica 15 <sup>o</sup>
Caso	t <sub>cpu</sub>	$I_d$	$C_{Fv}$	$C_{Fv}/C_{Fvi}$	$C_{Fv}$
C01	23:47:39	24,5201	1,8965-0,0038	79,6%	1,8764-0,0073
C02	24:07:39	23,2168	1,8629 - 0,0047	78,2%	1,8526-0,0075
C03	29:20:31	23,2167	1,8640 - 0,0047	78,2%	1,8533-0,0075
C04	23:26:09	21,8003	1,7992 - 0,0052	86,4%	1,7932-0,0076
C05	23:47:58	23,9814	1,8690-0,0039	81,8%	1,8536-0,0074
C06	23:53:05	24,5201	$1,\!8965 - 0,\!0038$	79,6%	1,8763-0,0074
C07	23:19:57	24,5201	$1,\!8965 - 0,\!0038$	79,6%	1,8763-0,0074
C08	47:46:28	18,6985	1,9658 - 0,0054	82,5%	1,9581-0,0074
C09	16:27:57	25,0696	1,8463 - 0,0035	77,5%	1,8132-0,0069
C10	24:25:00	24,8950	1,8273 - 0,0017	76,8%	1,7870-0,0051
C11	20:26:18	24,7820	1,8679 - 0,0029	78,4%	1,8389-0,0059
C12	97:14:47	25,1480	$1,\!8892 - 0,\!0038$	79,3%	1,8663-0,0076
C14	105:22:06	23,6474	1,8582 - 0,0047	78,0%	1,8446-0,0078
C15	97:52:20	24,7717	1,8850 - 0,0036	79,1%	1,8630-0,0075
C16	44:52:57	24,9963	$1,\!9000-0,\!0107$	79,5%	1,8812-0,0168
C17	33:13:27	24,7651	$1,\!8975-0,\!0057$	79,6%	1,8783-0,0112

Tabela 6.3: Comparação entre o desempenho das tubeiras cônicas otimizadas com o desempenho de tubeiras cônicas de  $15^{\circ}$ .

Pelos casos C12 e C15 observa-se que a simulação da utilização de refrigeração, através da aplicação da condição de Dirichlet na parede da tubeira, reduz 1,5% a inclinação ótima da tubeira. O comprimento da tubeira influencia levemente a inclinação ótima das tubeiras cônicas, como pode ser observado nos casos C01, C10 e C11.

Pelos casos C01, C08 e C09, pode-se observar que o raio da garganta influencia de forma significativa a inclinação ótima da parede. Isto se deve ao fato de que o incremento na área da garganta aumenta significativamente o fluxo, o que requer maior expansão dos gases na seção divergente. Neste sentido, o caso C08 apresentou a menor inclinação ótima para a parede.



Figura 6.3: Relação entre o desempenho e a inclinação da parede para alguns casos de tubeiras cônicas.

### 6.3 Otimização de Tubeiras Parabólicas

A tubeira de perfil parabólico é definida utilizando-se a seção convergente apresentada na Fig. 6.1 ligada a uma seção divergente. A seção divergente é obtida através da intersecção do arco de circunferência que forma a garganta da tubeira com uma função parabólica, conforme apresentado na figura 6.4. A geometria da parede entre o arco de circunferência e a saída é definida como uma função parabólica da seguinte forma:

$$x = \bar{\gamma} + \bar{\beta}r + \bar{\alpha}r^2 \qquad \text{ou} \qquad r = \frac{-\bar{\beta} + \sqrt{\bar{\beta}^2 - 4\bar{\alpha}(\bar{\gamma} - x)}}{2\bar{\alpha}} \tag{6.2}$$

onde x é a coordenada axial; r é o raio da tubeira; e  $\bar{\alpha}$ ,  $\bar{\beta}$  e  $\bar{\gamma}$  são constantes da parábola.

O perfil da tubeira parabólica é definido por três variáveis, o raio na saída, o raio na intersecção do arco de circunferência da garganta com a parede parabólica e a inclinação neste ponto. As duas últimas variáveis podem ser reduzidas em apenas uma, escolhendo um valor de  $x(x_I)$  no qual o arco de circunferência está definido e calculando tais variáveis, ou seja, o raio



para esta coordenada e a inclinação do arco de circunferência neste ponto.

Figura 6.4: Perfil da tubeira parabólica a ser otimizada.

Destaca-se, no entanto, que o perfil parabólico utilizado nesta seção possui o eixo da parábola coincidente com o eixo de simetria da tubeira. Tal forma de construção é uma simplificação da situação prática, onde o eixo da parábola é independente do eixo de simetria da tubeira. A adoção de tal metodologia aumentaria um parâmetro na otimização de tubeiras com este perfil.

Na construção da tubeira parabólica a garganta é posicionada em x = 0. Neste caso, a coordenada de intersecção do arco com a parabola é igual a distância da coordenada da garganta com a coordenada do ponto de intersecção ( $x_I$ ). Na otimização da geometria da tubeira parabólica foram considerados valores de  $x_I$  entre 40 e 80% do raio de curvatura da garganta na seção divergente ( $r_{cgd}$ ). O intervalo de busca do raio da saída da tubeira ( $r_{exit}$ ) foi entre 0,2 e 0,6 m.

A Tab. 6.4 apresenta os resultados obtidos na otimização da tubeira parabólica juntamente com o tempo necessário para realizar cada otimização. A Tab. 6.5 apresenta a comparação entre as tubeiras parabólicas otimizadas com tubeiras de  $15^{\circ}$ , tubeiras cônicas com mesma razão de expansão de área, denotadas por Cônica  $\varepsilon$ , e tubeiras com coeficiente de empuxo ideal.

Pela Tab. 6.5 pode-se observar que na comparação entre as tubeiras parabólicas otimizadas e tubeiras cônicas de 15<sup>o</sup>, o ganho ficou em torno de 3,0%, chegando a 3,7% no caso C10. Na comparação do coeficiente de empuxo da tubeira otimizada com tubeiras cônicas de mesma razão de área, o ganho médio ficou em torno de 1,8%, chegando a 2,1% no caso C16. O desempenho das tubeiras parabólicas otimizadas ficou entre 77,7% e 87,8% do desempenho da tubeira ideal.

Casa		Pa	arabólica oti	mizada	
Caso	t <sub>cpu</sub>	$x_I$	<i>r</i> exit	ε	$C_{Fv}$
C01	34:06:44	0,0327343	0,463016	85,7534	1,9252 - 0,0002
C02	34:54:04	0,0316365	0,435838	75,9818	1,8913-0,0005
C03	37:56:56	0,0316540	0,436741	76,2971	$1,\!8923 - 0,\!0005$
C04	33:07:07	0,0301569	0,412750	68,1451	1,8235 - 0,0013
C05	33:30:36	0,0321264	0,449774	80,9185	1,8965-0,0013
C06	33:56:47	0,0327340	0,463017	85,7540	$1,9252 \pm -$
C07	33:42:33	0,0327354	0,463005	85,7494	$1,9252 \pm -$
C08	52:46:24	0,0328759	0,416128	192,4029	$1,9970 \pm -$
C09	23:36:42	0,0320574	0,497979	50,6087	1,8697 - 0,0002
C10	38:59:43	0,0313580	0,306737	37,6351	$1,8471 \pm$
C11	25:42:34	0,0320913	0,385550	59,4595	$1,8927\pm$ —
C12	148:53:30	0,0322971	0,467063	87,2590	$1,\!9149-0,\!0002$
C14	158:43:07	0,0313253	0,441805	78,0767	$1,\!8837 - 0,\!0008$
C15	147:03:02	0,0317770	0,462702	85,6373	$1,\!9101-0,\!0002$
C16	36:02:10	0,0064827	0,472413	89,2694	1,9288 - 0,0033
C17	36:15:41	0,0196907	0,468259	87,7066	$1,\!9267-0,\!0004$

Tabela 6.4: Resultados das otimizações dos parâmetros das tubeiras parabólicas.

Na comparação entre o desempenho das tubeiras parabólicas otimizadas e tubeiras cônicas com mesma razão de expansão, observa-se que as tubeiras parabólicas apresentaram desempenho, em média, 1,7% superior ao das tubeiras cônicas. Tal diferença também é observada na comparação entre as tubeiras cônicas otimizadas e parabólicas otimizadas.

O desempenho de todas as tubeiras parabólicas otimizadas ficou acima de 76,8% do desempenho da tubeira ideal. O melhor desempenho nesta comparação ficou com o caso C04, com 87,8%, onde utilizou-se a menor temperatura de estagnação. Na comparação com a tubeira ideal, o desempenho médio das tubeiras parabólicas otimizadas ficou em torno de 81%.

Pelos casos C12 e C15 observa-se que a simulação da utilização de refrigeração, através da aplicação da condição de Dirichlet na parede da tubeira, reduz em torno de 1% o raio de saída da tubeira parabólica. Através dos casos C01, C06 e C07, observa-se que a pressão de estagnação não influencia a geometria ótima das tubeiras parabólicas.

Caso	Tubeira cônica	a 15 <sup>0</sup>	Tubeira côni	ca E	Tubeira ideal	
C01	1,8764 - 0,0073	103,0%	1,8950-0,0045	101,8%	2,37745643	81,0%
C02	1,8526 - 0,0075	102,5%	1,8616-0,0061	101,9%	2,37745643	79,5%
C03	1,8533-0,0075	102,5%	1,8627-0,0061	101,9%	2,37745643	79,6%
C04	1,7932-0,0076	102,0%	1,7980-0,0065	101,7%	2,07527647	87,8%
C05	1,8536-0,0074	102,7%	1,8677 - 0,0055	101,8%	2,28104725	83,1%
C06	1,8763-0,0074	103,0%	1,8950-0,0046	101,8%	2,37745643	81,0%
C07	1,8763-0,0074	103,0%	1,8950-0,0046	101,8%	2,37745643	81,0%
C08	1,9581 - 0,0074	102,4%	1,9640 - 0,0057	102,0%	2,37745643	84,0%
C09	1,8132-0,0069	103,5%	1,8451 - 0,0042	101,6%	2,37745643	78,6%
C10	1,7870 - 0,0051	103,7%	1,8265-0,0023	101,3%	2,37745643	77,7%
C11	1,8389-0,0059	103,3%	1,8665-0,0038	101,6%	2,37745643	79,6%
C12	1,8663-0,0076	103,0%	1,8873-0,0048	101,7%	2,37745643	80,5%
C14	1,8446 - 0,0078	102,5%	1,8565 - 0,0058	101,7%	2,37745643	79,2%
C15	1,8630-0,0075	102,9%	1,8830-0,0045	101,7%	2,37745643	80,3%
C16	1,8812-0,0168	103,3%	1,8984-0,0126	102,1%	2,37745643	81,0%
C17	1,8783-0,0112	103,2%	1,8960-0,0070	102,0%	2,37745643	81,0%

Tabela 6.5: Comparação entre o desempenho das tubeiras parabólicas otimizadas com o desempenho de tubeiras cônicas de  $15^{\circ}$ , tubeiras cônicas de mesma razão de expansão ( $\varepsilon$ ) e tubeiras com coeficiente de empuxo ideal.

O comprimento da tubeira influencia significativamente os parâmetros geométricos ótimos das tubeiras parabólicas, como pode ser observado na comparação entre os casos C01, C10 e C11. Tal influencia é devido a necessidade de redirecionamento dos gases em menor espaço. O menor raio de saída foi observado no caso C10, onde utilizou-se o menor comprimento da seção divergente.

Pelos casos C01, C08 e C09, pode-se observar que o raio da garganta influencia de forma significativa a geometria ótima das tubeiras parabólicas. Este efeito é esperado, devido a necessidade de aumentar a expansão dos gases com o incremento do fluxo, gerado com o aumento da área da garganta.

### 6.4 Otimização de Tubeiras Sino

A tubeira sino foi definida com a geometria da seção convergente apresentada na Fig. 6.1, seguida por uma seção divergente gerada a partir de uma spline cúbica. A spline que define a geometria da tubeira é definida pelo ponto de intersecção com o arco de circunferência da garganta e por outros pontos de controle.

A coordenada  $x(x_I)$  do ponto de intersecção do arco de circunferência com a spline, o raio  $(r_j)$  em cada um dos pontos de controle e a inclinação da parede na saída da tubeira  $(I_{exit})$  foram otimizados pelo DEPP. Foram utilizados entre 1 e 4 pontos de controle, localizados a distâncias da garganta iguais em  $0,1L_d, 0,3L_d, 0,6L_d$  e  $1,0L_d$ , conforme apresentado na Fig. 6.5.



Figura 6.5: Posição dos pontos de controle do contorno da tubeira sino [adaptado de Cai et al. (2007)].

No caso mais simples foram otimizados apenas a coordenada do ponto de intersecção  $(x_I)$ , o raio da tubeira na saída  $(r_{exit})$  e a inclinação da parede na saída  $(I_{exit})$ . Os resultados desta etapa são apresentados na Tab. 6.6 juntamente com o desempenho da tubeira otimizada e o tempo necessário para a otimização de cada caso avaliado.

Nas Tabs. 6.7, 6.8 e 6.9 são apresentados os resultados obtidos na otimização de tubeiras sino com 4, 5 e 6 parâmetros, respectivamente. Nestas simulações foram incluídas, uma a uma, as otimizações dos raios  $r_1$ ,  $r_2$  e  $r_3$ . Os casos C06 e C07 não foram considerados na otimização de tubeiras sino, por não terem influenciado as geometrias ótimas das tubeiras cônicas e parabólicas.

Casa		Sino otimizada						
Caso	t <sub>cpu</sub>	$x_I$	<i>r</i> exit	<i>I<sub>exit</sub></i>	$C_{Fv}$			
C01	36:16:50	0,0299996	0,456136	12,7657	1,92721 - 0,00004			
C02	52:50:31	0,0288960	0,428716	11,7483	1,89341 - 0,00068			
C03	67:26:46	0,0291017	0,431357	11,8185	1,89445 - 0,00065			
C04	168:02:33	0,0277735	0,407764	11,1186	1,82539-0,00150			
C05	52:46:54	0,0293393	0,442170	12,2900	1,89852 - 0,00030			
C08	145:25:17	0,0297203	0,409459	12,0190	$1,99888 \pm$			
C09	33:55:44	0,0298759	0,493244	13,2878	1,87164 - 0,00021			
C10	39:24:26	0,0290931	0,303352	13,6839	$1,84853 \pm$			
C11	37:31:56	0,0296792	0,381139	13,1211	1,89451 + 0,00007			
C12	176:57:43	0,0299519	0,460842	14,2528	1,91627 - 0,00029			
C14	196:30:25	0,0290863	0,436691	13,2346	1,88520 - 0,00097			
C15	160:51:35	0,0295292	0,456757	13,9687	1,91152 - 0,00036			
C16	37:05:45	0,0060514	0,464254	12,6310	1,93178 - 0,00331			
C17	36:47:46	0,0181787	0,461284	12,7319	1,92919 - 0,00054			

Tabela 6.6: Resultados da otimização de três parâmetros da tubeira sino.

Pelos resultados apresentados na Tab. 6.9 pode-se observar que o raio da tubeira na saída é significativamente afetado pela escolha do modelo físico utilizado. Pode-se observar decrementos de 5,08 e 3,69% quando utilizamos os modelos invíscido monoespécie com propriedades variáveis e congelado, respectivamente, ao invés do modelo invíscido com propriedades constantes. O raio na saída da tubeira ótimo também é muito afetado pela temperatura do gás, apresentando uma diferença de 10,36% na comparação entre os escoamento com temperaturas de 1000 e 3000 K (casos C01 e C04).

O raio da garganta da tubeira também influencia o raio da saída ótimo, observando-se um decremento de 9,96% na utilização do raio de garganta igual a 0,03 m e incremento de 6,25% para o raio de garganta igual a 0,07 m, ambos comparados ao caso C01 que possui raio de garganta igual a 0,05 m. Na comparação entre o raio da tubeira dos casos C10 e C11 são respectivamente 11,90% e 1,77% menores do que o raio que a tubeira do caso C01 teria se fosse truncada com mesmo comprimento das demais. A influência do raio de curvatura na garganta na seção divergente é observada pela comparação entre os casos C16 e C17 com o caso C01, onde observa-se aumentos de 1,83% e 1,09%, respectivamente.

Case			Sino	otimizada		
Caso	t <sub>cpu</sub>	$x_I$	$r_1$	r <sub>exit</sub>	Iexit	$C_{Fv}$
C01	41:05:07	0,0281636	0,1090255	0,456127	12,9980	1,92730-0,00014
C02	45:13:02	0,0270954	0,1061211	0,428603	11,9957	1,89353-0,00088
C03	66:20:49	0,0262279	0,1043796	0,427182	11,5764	1,89442-0,00119
C04	51:30:15	0,0255372	0,1027101	0,405551	11,3026	1,82549 - 0,00171
C05	42:32:27	0,0275073	0,1073400	0,442357	12,5425	1,89861 - 0,00046
C08	103:26:07	0,0295184	0,0889163	0,409475	12,0445	$1,99888 \pm$
C09	39:57:42	0,0264842	0,1279201	0,492026	13,6249	1,87186-0,00046
C10	58:06:14	0,0000747	0,0802034	0,309668	14,5472	1,84870 - 0,00005
C11	105:21:00	0,0272687	0,0944469	0,381172	13,4019	1,89464 + 0,00000
C12	218:01:32	0,0281428	0,1090203	0,461606	14,3084	1,91635 - 0,00039
C14	161:05:06	0,0251415	0,1030770	0,441635	13,7555	1,88461 - 0,00181
C15	213:50:50	0,0280202	0,1078728	0,460936	14,3029	1,91162 - 0,00051
C16	54:18:13	0,0052106	0,1165492	0,463713	13,3222	1,93241 - 0,00416
C17	63:13:12	0,0165213	0,1134733	0,461418	13,1306	1,92942 - 0,00088

Tabela 6.7: Resultados da otimização de quatro parâmetros da tubeira sino.

Tabela 6.8: Resultados da otimização de cinco parâmetros da tubeira sino.

Casa				Sino otimi	zada		
Caso	t <sub>cpu</sub>	$x_I$	$r_1$	$r_2$	r <sub>exit</sub>	<i>I<sub>exit</sub></i>	$C_{Fv}$
C01	45:25:58	0,0275711	0,110188	0,228531	0,456062	12,3543	1,92744 - 0,00010
C02	95:07:05	0,0264759	0,107354	0,218225	0,428749	11,2854	1,89367 - 0,00081
C03	59:05:42	0,0260581	0,106841	0,218485	0,425622	11,5837	1,89461 - 0,00084
C04	137:32:04	0,0250474	0,104076	0,207895	0,406096	10,6676	1,82560 - 0,00181
C05	84:03:00	0,0269558	0,108524	0,222995	0,442712	11,9675	1,89874 - 0,00040
C08	125:16:27	0,0288938	0,090568	0,202222	0,409368	11,1474	$1,99920 \pm$
C09	59:47:58	0,0261052	0,128765	0,250141	0,492389	13,2808	1,87190 - 0,00042
C10	100:55:26	0,0005091	0,083691	0,161028	0,311491	12,6942	$1,84930 \pm$
C11	113:11:28	0,0268817	0,095082	0,191400	0,381388	12,9835	1,89469 + 0,00000
C12	205:55:27	0,0280491	0,109513	0,227157	0,469553	12,0360	1,91599 - 0,00051
C14	254:52:28	0,0254480	0,108221	0,219733	0,431344	14,5773	1,88493 - 0,00107
C15	179:32:06	0,0250192	0,111670	0,234216	0,462621	12,8176	1,91109 - 0,00015
C16	44:07:48	0,0050478	0,119052	0,238117	0,465396	12,3564	1,93267 - 0,00398
C17	84:02:20	0,0160603	0,114996	0,233888	0,461269	12,3379	1,92962 - 0,00083

Casa			Sin	io otimizada	Ļ		
Caso	t <sub>cpu</sub>	$x_I$	$r_1$	$r_2$	<i>r</i> <sub>3</sub>	<i>r</i> exit	<i>I<sub>exit</sub></i>
C01	50:42:27	0,0275151	0,110120	0,229070	0,350492	0,456467	12,0106
C02	103:47:43	0,0243829	0,107543	0,220951	0,334168	0,433287	10,1095
C03	105:36:49	0,0218963	0,109578	0,227516	0,340880	0,439641	9,7886
C04	88:10:56	0,0248369	0,104089	0,209584	0,316594	0,409167	10,6110
C05	125:07:21	0,0266676	0,108555	0,223799	0,341527	0,444029	11,5743
C08	110:06:47	0,0290512	0,090679	0,203120	0,314724	0,410998	10,7254
C09	54:13:47	0,0220182	0,124297	0,248141	0,373049	0,484983	11,5677
C10	73:08:13	0,0006643	0,085173	0,166457	0,242473	0,308791	11,9609
C11	74:24:13	0,0327179	0,098165	0,198411	0,303295	0,402071	13,4739
C12	209:09:50	0,0292610	0,112703	0,229139	0,344578	0,445563	11,2355
C14	274:46:48	0,0188511	0,101014	0,206363	0,319830	0,431055	12,6879
C15	218:44:14	0,0300985	0,112000	0,226726	0,349810	0,453856	12,2915
C16	118:50:40	0,0050328	0,118861	0,238052	0,358938	0,464810	12,1379
C17	76:41:40	0,0160268	0,114948	0,234325	0,355713	0,461442	11,9641

Tabela 6.9: Resultados da otimização de seis parâmetros da tubeira sino.

O efeito da utilização do modelo viscoso comparado ao invíscido é apresentado na comparação entre os casos C01 com C12 e C03 com C14, onde observa-se redução de 2,39% e 1,95% no raio da saída, respectivamente. Pela comparação entre os casos C12 e C15 pode-se observar que a condição de parede com refrigeração (caso C15) fornece raio de saída da tubeira 1,86% maior do que para o escoamento adiabático (caso C12).

O desempenho das tubeiras sino com a otimização de 6 parâmetros é apresentado nas Tabs. 6.10 e 6.11. Nestas tabelas são apresentados os coeficiente de empuxo de tubeiras ideais, tubeiras cônicas de 15<sup>0</sup>, tubeiras cônicas com a mesma razão de expansão de área (denotada por Cônica  $\varepsilon$ ) e tubeiras obtidas com a metodologia apresentada por Anderson Jr. (1990), baseada no método das características.

O desempenho obtido na otimização da tubeira sino com seis parâmetros é muito próximo aos desempenhos obtidos na otimização de tubeiras sino com três, quatro ou cinco parâmetros. Em alguns casos, o desempenho obtido pela tubeira sino com seis parâmetros é menor do que os desempenhos para tubeiras sino com menos pontos de controle. Tais resultados mostram que para a otimização com todos os pontos de controle não houve total convergência dos resultados, permitindo uma pequena melhoria nos resultados apresentados.

Caso	Sino otimizada	Tubeira ideal		Tubeira cônica	de 15 <sup>0</sup>
C01	1,92745 - 0,00007	2,37745643	81,1%	1,8764 - 0,0073	103,1%
C02	1,89350-0,00093	2,37745643	79,6%	1,8526 - 0,0075	102,6%
C03	1,89388-0,00062	2,37745643	79,6%	1,8533-0,0075	102,6%
C04	1,82560-0,00175	2,07527647	87,9%	1,7932-0,0076	102,1%
C05	1,89878-0,00039	2,28104725	83,2%	1,8536-0,0074	102,8%
C08	1,99921±—	2,37745643	84,1%	1,9581 - 0,0074	102,5%
C09	1,87137 - 0,00085	2,37745643	78,6%	1,8132-0,0069	103,6%
C10	1,84842±—	2,37745643	77,7%	1,7870 - 0,0051	103,7%
C11	1,89332±—	2,37745643	79,6%	1,8389-0,0059	103,3%
C12	1,91561 - 0,00010	2,37745643	80,6%	1,8663-0,0076	103,1%
C14	1,88357 - 0,00256	2,37745643	79,1%	1,8447 - 0,0078	102,4%
C15	1,91121 - 0,00010	2,37745643	80,4%	1,8630-0,0074	103,0%
C16	1,93267 - 0,00401	2,37745643	81,1%	1,8813-0,0165	103,4%
C17	1,92962-0,00083	2,37745643	81,1%	1,8783-0,0110	103,3%

Tabela 6.10: Comparação entre o desempenho das tubeiras sino otimizadas com o desempenho de tubeiras com coeficiente de empuxo ideal e cônicas de 15<sup>0</sup>.

Na Fig. 6.6 é apresentado um comparativo do percentual de aumento de desempenho da tubeira sino com seis parâmetros em relação às tubeiras cônica otimizada, parabólica otimizada, cônica  $15^{\circ}$  e cônica com mesma razão de expansão (cônica  $\varepsilon$ ) e sino obtida pelo método das características, para cada caso avaliado.

Pela Fig. 6.6 pode-se observar que o desempenho da tubeira sino com seis parâmetros otimizada é no máximo 0,2% maior que o desempenho da tubeira parabólica otimizada. Na comparação com a tubeira cônica otimizada o ganho percentual ficou entre 1,25 e 2,08%. O desempenho da tubeira obtida pelo método das característica, apresentado por Anderson Jr. (1990), apresentou os piores desempenhos, observando-se ganho de até 4,68% no caso C10.

Os resultados apresentados na Fig. 6.6 mostram que o desempenho da tubeira parabólica otimizada é muito próximo ao desempenho da tubeira sino otimizada com seis parâmetros. Com base em tais resultados pode-se utilizar a tubeira parabólica ao invés da sino, sem perda significativa no desempenho e grande redução da complexidade do processo de otimização da geometria.

Caso	Sino otimizada	Tubeira cônica $\varepsilon$		Tubeira de Anderso	on Jr. (1990)
C01	1,92745 - 0,00007	1,8945-0,0048	102,0%	1,8737 - 0,0123	103,5%
C02	1,89350-0,00093	1,8615 - 0,0058	102,0%	1,8533-0,0127	102,8%
C03	1,89388-0,00062	1,8629-0,0058	101,9%	$1,8538 \pm$	102,1%
C04	1,82560-0,00175	1,7979-0,0066	101,8%	1,7926-0,0138	102,5%
C05	1,89878-0,00039	1,8672 - 0,0054	102,0%	1,8512-0,0137	103,3%
C08	1,99921±—	1,9643-0,0052	102,0%	1,9612-0,0143	102,7%
C09	1,87137 - 0,00085	1,8439-0,0043	101,7%	1,8048-0,0107	104,3%
C10	1,84842±—	1,8267-0,0022	101,3%	1,7762-0,0104	104,7%
C11	1,89332±—	1,8677-0,0031	101,5%	1,8334-0,0117	103,9%
C12	1,91561 - 0,00010	1,8850 - 0,0055	101,9%	1,8612-0,0123	103,6%
C14	1,88357-0,00256	1,8556-0,0060	101,7%	$1,8428 \pm$	102,1%
C15	1,91121 - 0,00010	1,8822 - 0,0052	101,8%	1,8575-0,0116	103,5%
C16	1,93267 - 0,00401	1,8978-0,0129	102,3%	1,8737 - 0,0123	103,6%
C17	1,92962-0,00083	1,8954 - 0,0072	102,1%	1,8737 - 0,0123	103,6%

Tabela 6.11: Comparação entre o desempenho das tubeiras sino otimizadas com o desempenho de tubeiras cônicas de mesma razão de expansão ( $\varepsilon$ ) e tubeiras de Anderson Jr. (1990).



Figura 6.6: Diferença percentual entre o desempenho da tubeira sino otimizada em comparação às tubeiras cônica otimizada, parabólica otimizada, cônica de 15<sup>0</sup>, cônica com mesma razão de expansão e sino de Anderson Jr. (1990).

As diferentes geometrias comparadas são apresentadas na Fig. 6.7 (Caso C01). Desta figura pode-se observar que a tubeira que possui a maior razão de expansão de área é a cônica otimizada, enquanto que a tubeira obtida pela metodologia de Anderson Jr. (1990) possui a menor razão. As geometrias obtidas pelas otimizações das tubeiras parabólica e sino são muito parecidas.



Figura 6.7: Comparação entre as geometrias obtidas nas otimizações do caso C01 com as geometrias de referência.

Na otimização das tubeiras com diferentes quantidades de variáveis foi utilizado quantidade de núcleos computacionais igual ao tamanho da população do DEPP. Com isto, o tempo total de processamento foi significativamente reduzido, comparado ao tempo necessário para processamento serial.

Com o aumento do número de incógnitas e, consequentemente, de núcleos, a razão entre o tempo total e o número de chamadas da função objetivo (Mach2D) reduziu significativamente, conforme é apresentado na Fig. 6.8. Por esta figura, pode-se observar que para o caso C01 da tubeira cônica, a relação entre o tempo total e o número de chamadas é menor que 20% do tempo de processamento de apenas uma chamada do Mach2D.



Figura 6.8: Relação entre o tempo de processamento total e o número de chamadas do Mach2D para todos os casos avaliados.

## 6.5 Otimização da Tubeira de Rao (1958)

Para avaliar a eficiência dos resultados obtidos pelo DEPP foi considerado o problema proposto por Rao (1958) em que a geometria da seção divergente é determinada. Os pontos que definem a tubeira obtida por Rao (1958) foram ajustados por uma spline cúbica. Tais pontos são apresentados na Fig. 6.9 juntamente com a geometria obtida pelo ajuste de curvas.



Figura 6.9: Geometria da tubeira ajustada aos pontos apresentados por Rao (1958).

Conforme Rao (1958), para pressão ambiente nula a geometria determinada por sua metodologia depende apenas da razão entre calores específicos ( $\gamma$ ). Para reproduzir as condições definidas por Rao (1958) foram utilizadas as condições de escoamento apresentadas na Tab. 6.12, para a otimização de uma tubeira sino com 6 parâmetros.

Tabela 6.12: Parâmetros físicos e geométricos utilizados na simulação do escoamento para otimização da tubeira do artigo de Rao (1958).

Parâmetros geométricos	Raio da garganta $(r_g) [m]$		
	Raio de curvatura na entrada da tubeira $(r_{cin})$ [m]		
	Raio de curvatura na seção convergente da garganta $(r_{cgc})$ [m]		
	Raio de curvatura na seção divergente da garganta $(r_{cgd})$ [m]		
	Inclinação da parede da seção convergente $(I_c)$ [graus]		
	Comprimento da seção convergente $(L_C)$ [m]		
	Comprimento da seção divergente $(L_d)$ [m]	0,4095	
Parâmetros físicos	Temperatura de estagnação $(T_0)$ [K]		
	Pressão de estagnação $(p_0)$ [Pa]		
	Razão entre calores específicos $(\gamma)^1$		
	Constante do gás (R) $[J/kg \cdot K]^1$	461,51	
	Calor específico a pressão constante ( $c_p$ ) $[J/kg \cdot K]^2$	2467,65	

Os resultados dos parâmetros otimizados são apresentados na Tab. 6.13, juntamente com os valores obtidos pelo ajuste de curvas dos pontos fornecidos por Rao (1958). A solução numérica obtida para a tubeira fornecida por Rao (1958) com a respectiva estimativa de erro é  $C_{Fv} = 1,73401 - 0,00013$ , enquanto que para a tubeira otimizada tem-se  $C_{Fv} = 1,73457 -$ 0,00061. Destes resultados pode-se afirmar que a metodologia aplicada neste trabalho fornece resultados tão bons quanto os obtidos por Rao (1958), sem apresentar as limitações contidas nas simplificações impostas ao modelo matemático e condições de operação aplicadas pelo referido autor.

Tabela 6.13: Resultados da otimização de seis parâmetros da tubeira de Rao (1958).

Caso	Parâmetros otimizados						
	x <sub>I</sub>	$r_1$	$r_2$	$r_3$	r <sub>exit</sub>	<i>I<sub>exit</sub></i>	ε
Rao (1958)	0,0128304	0,0723417	0,118910	0,171680	0,220000	13,9007	19,36
Radtke (2014)	0,0093563	0,0698927	0,116525	0,168119	0,217507	12,1533	18,92

<sup>1</sup>Variável prescrita apenas para escoamento monoespécie.

<sup>2</sup>Variável prescrita apenas para escoamento monoespécie com propriedades constantes.

# 7 Conclusão

Neste capítulo são apresentados os principais resultados e contribuições obtidas no presente trabalho.

### 7.1 Resultados

Os principais resultados obtidos neste trabalho são listados a seguir:

- Um novo tipo de malha foi proposta e implementada no Mach2D. Tal malha possui distribuição não uniforme com concentração de volumes na garganta e foi utilizada para as simulações dos escoamentos invíscidos e viscosos. Para o escoamento viscoso foi proposta uma malha baseada nas distribuições PG e uniforme. Com isto, foi obtida melhoria na robustez e convergência do código Mach2D, além da redução do erro de discretização;
- Soluções numéricas para diversas variáveis de interesse em escoamentos invíscidos e viscosos, monoespécie e congelado foram apresentadas com grande acurácia e com as estimativas dos erros numéricos, para que possam ser utilizadas como referência (*benchmark*) na verificação de outros códigos;
- Os resultados obtidos neste trabalho para tubeiras cônicas confirmam os estudos experimentais realizados por Bloomer, Antl e Renas (1961), que a inclinação ideal para uma tubeira cônica operar no vácuo é de aproximadamente 25°. Os resultados das tubeiras cônicas otimizadas foi de até 2,46% superior a uma tubeira cônica de 15° de mesmo comprimento;
- Apresentou-se uma metodologia capaz de obter geometrias equivalentes a obtida por Rao (1958) com a vantagem de ser aplicada a modelos mais realistas;
- Determinou-se que a influência do modelo físico-químico (monoespécie com propriedades constantes, monoespécie com propriedades variáveis ou multiespécie

congelado) é superior ao efeito da viscosidade na geometria ótima das tubeiras. Observou-se diferença inferior a 2,4% no raio de saída quando comparados os modelos invíscido e viscoso. Na comparação entre os diferentes modelos físico-químicos observou-se diferença de até 5,08% no raio de saída da tubeira sino.

- Verificou-se que a temperatura do gás influencia significativamente a geometria ótima da tubeira, observando-se variações de até 10,36% no raio de saída entre as diferentes temperatura consideradas;
- Mostrou-se que o raio da garganta também influencia a geometria ótima, observando-se diferença de 9,96% no raio da saída entre as tubeiras com 0,03 e 0,05 m de raio. O raio de curvatura na garganta apresentou pouca diferença na geometria ótima, com variação de apenas 1,83% do raio da saída.

#### 7.2 Contribuições

As principais contribuições obtidas com a realização deste trabalho são listadas a seguir:

- Dois tipos de malhas foram propostos e melhoria na solução numérica e robustez do Mach2D foi verificada;
- Verificação e validação dos resultados computacionais obtidos pelo código Mach2D para as equações de Euler e Navier-Stokes para escoamentos monoespécie e congelado;
- Desenvolvimento de um código computacional baseado no algoritmo de Evolução Diferencial (DEPP) com programação paralela e acoplamento ao Mach2D para a otimização da geometria das tubeiras;
- Validação do código computacional DEPP na resolução de problemas clássicos de otimização e da geometria nas mesmas condições apresentadas por Rao (1958), além do ganho de tempo computacional com a utilização de processamento parelelo;
- Determinação da geometria de tubeiras cônicas, parabólicas e sino cujo desempenho seja ótimo, para uma determinada condição de operação e uma dada área de garganta; e
- Verificou-se que o desempenho da tubeira parabólica otimizada é muito próximo ao desempenho da tubeira sino otimizada com seis parâmetros. Tal resultado nos permite utilizar a tubeira parabólica ao invés da sino, sem perda significativa no desempenho e grande redução da complexidade do processo de otimização da geometria.

- Mostrou-se que a utilização de tubeiras sino com otimização de apenas três parâmetros fornecem desempenho muito próximo aos obtidos com maior quantidade de pontos de controle;
- Mostrou-se que a aplicação de diferentes modelos matemáticos, modelos físicos, raio na garganta, raio de curvatura na garganta, comprimento e temperatura do gás interferem na geometria ótima da tubeira;
- Determinação da influência do modelo matemático, da condição de contorno na parede (parede adiabática ou refrigerada) e das condições de operação (temperatura de estagnação e pressão de estagnação) sobre a geometria ótima de tubeiras com diferentes dimensões.

#### 7.3 Trabalhos Futuros

A definição da geometria de tubeiras com maior empuxo não implica que este desempenho adicional será totalmente revertido em ganho real, uma vez que, em geral, tais tubeiras possuem maior área de parede e, consequentemente, maior peso. A otimização da geometria de tubeiras mantendo o peso (área da parede) constante é algo que apresenta um ganho mais próximo do real do que os resultados apresentados neste trabalho.

A melhor representação do escoamente no interior das tubeiras se mostrou de grande importância na determinação da geometria ótima. Portanto, a aplicação de modelos matemáticos e físico-químicos mais realistas, tais como escoamento turbulento e de equilíbrio químico local, são melhorias que devem ser implementadas para melhorar a solução ótima.

A geometria ótima da tubeira varia dependendo da altitude de operação do foguete. Tal característica deve ser considerada na otimização de motores-foguete que trabalham em altitudes muito variáveis. Neste caso, a otimização da geometria da tubeira deve considerar a trajetória do foguete, o que consiste em um problema em aberto que necessita melhor estudo. Neste contexto, a otimização global do foguete (propulsão e aerodinâmica) também requer maiores estudos.

# Referências Bibliográficas

ALLMAN, J.; HOFFMAN, J. Design of maximum thrust nozzle contours by direct optimization methods. *AIAA JOURNAL*, v. 19, n. 6, p. 750–751, 1981.

ANDERSON JR., J. D. *Modern compressible flow: with historical perspective*. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 1990.

ARAKI, L. K. *Verificação de soluções numéricas de escoamentos reativos em motores-foguete*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2007.

ARRINGTON, L. A.; REED, B. D.; RIVERA JR., A. A performance comparison of two small rocket nozzles. *Technical Memorandum of National Aeronautics and Space Administration*, *NASA TM-107285, AIAA-96-2582*, 1996.

ASME. Standard for Verification an Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer. New York, 2009.

AZEVEDO, J. L. F. A finite difference method applied to internal axisymmetric flows. *Boletim da Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional*, v. 3, n. 1, p. 1–20, 1992.

BACK, L.; MASSIER, P.; GIER, H. Comparison of measured and predicted flows through conical supersonic nozzles with emphasis on transonic region. *AIAA JOURNAL*, v. 3, n. 9, p. 1606–1614, 1965.

BEANS, E. Nozzle design using generalized one-dimensional flow. *JOURNAL OF PROPULSION AND POWER*, v. 8, n. 4, p. 917–920, 1992.

BLOOMER, H. E.; ANTL, R. J.; RENAS, P. E. Experimental study of effects of geometric variables on performance of conical rocket-engine exhaust nozzles. *Technical Note of National Aeronautics and Space Administration, NASA TN-D-846*, 1961.

CAI, G. et al. Performance prediction and optimization for liquid rocket engine nozzle. *AEROSPACE SCIENCE AND TECHNOLOGY*, v. 11, n. 2-3, p. 155–162, 2007.

CAISSO, P. et al. A liquid propulsion panorama. *ACTA ASTRONAUTICA*, v. 65, n. 11-12, p. 1723–1737, 2009.

CAMPBELL, C. E.; FARLEY, J. M. Performance of several conical convergent-divergent rocket-type exhaust nozzles. *Technical Note of National Aeronautics and Space Administration, NASA TN D-467*, 1960.

COLEY, D. A. An introduction to genetic algorithms for scientists and engineers. Singapore: World Scientific, 1999.

EBRAHIMI, H. Validation database for propulsion computational fluid dynamics. *JOURNAL OF SPACECRAFT AND ROCKETS*, v. 34, n. 5, p. 642–649, 1997.

EYI, S.; EZERTAS, A.; YUMUSAK, M. Design optimization in non-equilibrium reacting flows. In: KUZMIN, A. (Ed.). *COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS 2010*. Berlin, 2011. p. 247–252.

FARLEY, J. M.; CAMPBELL, C. E. Performance of several method-of-characteristics exhaust nozzles. *Technical Note of National Aeronautics and Space Administration, NASA TN D-293*, 1960.

FEOKTISTOV, V. *Differential Evolution: in search of solutions*. New York: Springer Science, 2006.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. Computational methods for fluid dynamics. 3. ed. Berlin: Springer-Verlag, 2002.

FOX, R. W.; MCDONALD, A. T. *Introdução à mecânica dos fluidos*. 4. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 1998.

GOLDSMITH, M. The optimization of nozzle area ratio for rockets operating in a vacuum. *JET PROPULSION*, v. 28, n. 3, p. 170–172, 1958.

HAIDINGER, F. A. Influence of turbulence modeling on the performance prediction for rocket engine nozzles. *JOURNAL OF PROPULSION AND POWER*, v. 15, p. 523–529, 1999.

HOFFMAN, J. Design of compressed truncated perfect nozzles. *Journal of Propulsion and Power*, v. 3, n. 2, p. 150–156, 1987.

INCROPERA, F.; DEWITT, D. *Fundamentos de transferência de calor e de massa*. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1998.

KEELING, S. L. A strategy for the optimal design of nozzle contours. In: AMERICAN INSTITUTE OF AERONAUTICS AND ASTRONAUTICS. *AIAA 28th Thermophysics Conference*. Orlando, 1993.

KLIEGEL, J.; LEVINE, J. Transonic flow in small throat radius of curvature nozzles. *AIAA JOURNAL*, v. 7, n. 7, p. 1375–&, 1969.

KUO, K. K. Principles of combustion. New York: John Willey & Sons, 1986.

LAROCA, F. Solução de escoamentos reativos em bocais de expansão usando o método dos volumes finitos. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000.

MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional.* 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

MANSKI, D.; HAGEMANN, G. Influence of rocket design parameters on engine nozzle efficiencies. *JOURNAL OF PROPULSION AND POWER*, v. 12, n. 1, p. 41–47, 1996.

MARCHI, C.; MALISKA, C. A nonorthogonal finite-volume method for the solution of all speed flows using co-located variables. *NUMERICAL HEAT TRANSFER PART B-FUNDAMENTALS*, v. 26, n. 3, p. 293–311, 1994.

MARCHI, C. H. *Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2001.
MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. da. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. *Numerical Heat Transfer, Part B*, v. 42, p. 167 – 188, 2002.

MCBRIDE, B. J.; GORDON, S.; RENO, M. A. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. *Technical Memorandum of National Aeronautics and Space Administration, NASA TM-4513*, 1993.

PAVLI, A. J.; KACYNSKI, K. J.; SMITH, T. A. Experimental thrust performance of a high-area-ratio rocket nozzle. *Technical Paper of National Aeronautics and Space Administration, NASA TP-2720*, 1987.

RAO, G. V. R. Exhaust nozzle contour for optimum thrust. *JET PROPULSION*, v. 28, n. 6, p. 377–382, 1958.

RICHARDSON, L. F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, v. 210, p. 307–357, 1910.

ROACHE, P. Perspective - a method for uniform reporting of grid refinement studies. *JOURNAL OF FLUIDS ENGINEERING-TRANSACTIONS OF THE ASME*, v. 116, n. 3, p. 405–413, 1994.

ROACHE, P. J. Discussion: "factors of safety for richardson extrapolation" (xing, t., and stern, f., 2010, asme j. fluids eng., 132, p. 061403). *JOURNAL OF FLUIDS ENGINEERING-TRANSACTIONS OF THE ASME*, v. 133, n. 11, 2011.

ROY, C. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. *JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS*, v. 205, n. 1, p. 131–156, 2005.

SCHLEY, C.; HAGEMANN, G.; KRULLE, G. Towards an optimal concept for numerical codes simulating thrust chamber processes in high pressure chemical propulsion systems. *AEROSPACE SCIENCE AND TECHNOLOGY*, v. 1, n. 3, p. 203–213, 1997.

SMITH, T. A.; PAVLI, A. J.; KACYNSKI, K. J. Comparison of theoretical and experimental thrust performance of a 1030:1 area ratio rocket nozzle at a chamber pressure of 2413 kN/m<sup>2</sup> (350 psia). *Technical Paper of National Aeronautics and Space Administration, NASA TP-2725*, 1987.

STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution: A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces. *Technical Report TR-95-012, International Computer Science Institute*, 1995.

STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution: A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization*, v. 11, p. 341–359, 1997.

SUTTON, G. P.; BIBLARZ, O. *Rocket propulsion elements: an introduction to the engineering of rockets.* 7. ed. New York: JOHN WILEY & SONS, 2000.

SVEHLA, R. A. Thermodynamic and transport properties for the hydrogen-oxygen system. *National Aeronautics and Space Administration, NASA SP-3011*, 1964.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. Computational fluid mechanics and heat transfer. 2. ed. Philadelphia: Taylor & Francis, 1997.

TSUBOI, N.; ITO, T.; MIYAJIMA, H. Numerical study and performance prediction for gaseous hydrogen/oxygen bell nozzle. *TRANSACTIONS OF THE JAPAN SOCIETY FOR AERONAUTICAL AND SPACE SCIENCES*, v. 51, n. 172, p. 86–92, 2008.

VAN DOORMAAL, J.; RAITHBY, G. Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid-flows. *NUMERICAL HEAT TRANSFER*, v. 7, n. 2, p. 147–163, 1984.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. Malaysia: Longman Scientific & Technical, 1995.

VINCENZI, L.; SAVOIA, M. Improving the speed performance of an evolutionary algorithm by a second-order cost function approximation. In: . Lisbon:  $2^{nd}$  International Conference on Engineering Optimization, 2010.

WANG, T. Multidimensional unstructured-grid liquid rocket-engine nozzle performance and heat transfer analysis. *JOURNAL OF PROPULSION AND POWER*, v. 22, n. 1, p. 78–84, 2006.

WANG, T.; CHEN, Y. Unified navier-stokes flowfield and performance analysis of liquid rocket engines. *JOURNAL OF PROPULSION AND POWER*, v. 9, n. 5, p. 678–685, 1993.

#### **APÊNDICE A – Benchmarks**

Tabela A.1: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes obtidos com malhas tipo PG-melhorada para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

$n_x$	$n_y$	$a_1$	h	$C_d$	$p_U$	$C_{d\infty}$	U <sub>C</sub>
8	5	$64 \cdot 10^{-5}$	0,12500000	1,120432	não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	10	$32 \cdot 10^{-5}$	0,06250000	1,064539	não se aplica	não se aplica	não se aplica
32	20	$16 \cdot 10^{-5}$	0,03125000	1,029983	0,69374299	0,98472278	0,01070373
64	40	$8 \cdot 10^{-5}$	0,01562500	1,012070	0,94792832	0,99347302	0,00068347
128	80	$4 \cdot 10^{-5}$	0,00781250	1,003170	1,00925823	0,99432764	0,00005656
256	160	$2 \cdot 10^{-5}$	0,00390625	0,998762	1,01337528	0,99439351	0,00004031
512	320	$1 \cdot 10^{-5}$	0,00195313	0,996570	1,00819021	0,99439049	0,00001234
1024	640	$5 \cdot 10^{-6}$	0,00097656	0,995477	1,00372917	0,99438662	0,0000281
2048	1280	$25 \cdot 10^{-7}$	0,00048828	0,994931	1,00108554	0,99438504	0,0000041

Tabela A.2: Resultados do coeficiente de empuxo ( $C_{Fv}$ ) para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes obtidos com malhas tipo PG-melhorada para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

$n_x$	$n_y$	$a_1$	h	$C_{Fv}$	$p_U$	$C_{Fv\infty}$	U <sub>C</sub>
8	5	$64 \cdot 10^{-5}$	0,12500000	1,5781816	não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	10	$32 \cdot 10^{-5}$	0,06250000	1,5836357	não se aplica	não se aplica	não se aplica
32	20	$16 \cdot 10^{-5}$	0,03125000	1,5840397	3,755034	1,58425783	0,00018583
64	40	$8 \cdot 10^{-5}$	0,01562500	1,5857136	-2,050892	_	_
128	80	$4 \cdot 10^{-5}$	0,00781250	1,5874549	-0,056936	_	_
256	160	$2 \cdot 10^{-5}$	0,00390625	1,5886286	0,569060	1,5904291	0,0006268
512	320	$1 \cdot 10^{-5}$	0,00195313	1,5893003	0,805187	1,5900856	0,0001135
1024	640	$5 \cdot 10^{-6}$	0,00097656	1,5896573	0,912116	1,5900381	0,0000239
2048	1280	$25 \cdot 10^{-7}$	0,00048828	1,5898404	0,962771	1,5900285	0,0000049

			1				
$n_x$	<i>n</i> <sub>y</sub>	$a_1$	h	Isp	$p_U$	$I_{sp\infty}$	U <sub>C</sub>
8	5	$64 \cdot 10^{-5}$	0,12500000	262,8813	não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	10	$32 \cdot 10^{-5}$	0,06250000	277,6401	não se aplica	não se aplica	não se aplica
32	20	$16 \cdot 10^{-5}$	0,03125000	287,0282	0,652674	299,9274	3,5112
64	40	$8 \cdot 10^{-5}$	0,01562500	292,4171	0,800834	298,7423	0,9364
128	80	$4 \cdot 10^{-5}$	0,00781250	295,3351	0,885006	298,5171	0,2640
256	160	$2 \cdot 10^{-5}$	0,00390625	296,8580	0,938128	298,4508	0,0698
512	320	$1 \cdot 10^{-5}$	0,00195313	297,6367	0,967746	298,4334	0,0180
1024	640	$5\cdot 10^{-6}$	0,00097656	298,0305	0,983810	298,4287	0,0045
2048	1280	$25 \cdot 10^{-7}$	0,00048828	298,2284	0,992134	298,4274	0,0011

Tabela A.3: Resultados do impulso específico no vácuo  $(I_{sp})$  para o escoamento viscoso monoespécie com propriedades constantes obtidos com malhas tipo PG-melhorada para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

Tabela A.4: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para a os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

$n_x$	$n_y$	h	$C_d$	$p_U$	$C_{d\infty}$	$U_C$
4	2	0,25000000	1,29259360	não se aplica	não se aplica	não se aplica
8	4	0,12500000	1,12388295	não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	8	0,06250000	1,06892786	1,618226	1,02817596	0,01420320
32	16	0,03125000	1,03564767	0,723590	0,99345798	0,00890951
64	32	0,01562500	1,01816073	0,928385	0,99973612	0,00093767
128	64	0,00781250	1,00935599	0,989925	1,00048911	0,00006214
256	128	0,00390625	1,00495264	0,999679	1,00054831	0,0000098
512	256	0,00195313	1,00275166	1,000459	1,00055139	0,0000070
1024	512	0,00097656	1,00165106	0,999853	1,00055035	0,00000011
2048	1024	0,00048828	1,00110056	0,999468	1,00054986	0,0000020

<u>,</u>								
$n_x$	$n_y$	h	$C_{Fv}$	$p_U$	$C_{Fv\infty}$	U <sub>C</sub>		
4	2	0,25000000	1,6695522	não se aplica	não se aplica	não se aplica		
8	4	0,12500000	1,5849178	não se aplica	não se aplica	não se aplica		
16	8	0,06250000	1,5907930	3,8485403	1,5939497	0,0027185		
32	16	0,03125000	1,5919038	2,4030169	1,5925887	0,0004259		
64	32	0,01562500	1,5938716	-0,8249452	_	_		
128	64	0,00781250	1,5956606	0,1373697	1,6055095	0,0080598		
256	128	0,00390625	1,5968296	0,6139069	1,5985161	0,0005175		
512	256	0,00195313	1,5974941	0,8151033	1,5982637	0,0001052		
1024	512	0,00097656	1,5978477	0,9097067	1,5982258	0,0000244		
2048	1024	0,00048828	1,5980301	0,9555796	1,5982183	0,0000059		

Tabela A.5: Resultados do coeficiente de empuxo ( $C_{Fv}$ ) para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

Tabela A.6: Resultados do impulso específico no vácuo  $(I_{sp})$  para o escoamento invíscido monoespécie com propriedades variáveis obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

$n_x$	$n_y$	h	Isp	$p_U$	$I_{sp\infty}$	$U_C$
4	2	0,25000000	241,0607	não se aplica	não se aplica	não se aplica
8	4	0,12500000	263,1928	não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	8	0,06250000	277,7497	0,604439	299,0148	6,7082
32	16	0,03125000	286,8753	0,673717	299,1043	3,1035
64	32	0,01562500	292,1631	0,787249	298,4498	0,9989
128	64	0,00781250	295,0424	0,876909	298,2033	0,2815
256	128	0,00390625	296,5523	0,931329	298,1396	0,0774
512	256	0,00195313	297,3269	0,962947	298,1222	0,0207
1024	512	0,00097656	297,7195	0,980363	298,1175	0,0055
2048	1024	0,00048828	297,9172	0,989638	298,1163	0,0014

	1					
$n_x$	$n_y$	h	$C_d$	$p_U$	$C_{d\infty}$	U <sub>C</sub>
4	2	0,25000000	1,28912030	não se aplica	não se aplica	não se aplica
8	4	0,12500000	1,12320667	não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	8	0,06250000	1,06873783	1,606930	1,02819255	0,01392355
32	16	0,03125000	1,03559338	0,716663	0,99326294	0,00918597
64	32	0,01562500	1,01814400	0,925592	0,99971942	0,00097519
128	64	0,00781250	1,00935076	0,988710	1,00048790	0,00006963
256	128	0,00390625	1,00495113	0,999010	1,00054847	0,00000302
512	256	0,00195313	1,00275138	1,000048	1,00055171	0,0000007
1024	512	0,00097656	1,00165120	0,999591	1,00055070	0,0000031
2048	1024	0,00048828	1,00110084	0,999300	1,00055021	0,0000027

Tabela A.7: Resultados do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para o escoamento invíscido congelado obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

Tabela A.8: Resultados do coeficiente de empuxo ( $C_{Fv}$ ) para o escoamento invíscido congelado obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

$n_x$	$n_y$	h	$C_{Fv}$	$p_U$	$C_{Fv\infty}$	$U_C$
4	2	0,25000000	1,6619120	não se aplica	não se aplica	não se aplica
8	4	0,12500000	1,5828050	não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	8	0,06250000	1,5901559	3,427825	1,5942078	0,0032989
32	16	0,03125000	1,5917454	2,209277	1,5927595	0,0005755
64	32	0,01562500	1,5938648	-0,415026	—	_
128	64	0,00781250	1,5957046	0,204144	1,6026762	0,0051318
256	128	0,00390625	1,5968909	0,632988	1,5985611	0,0004838
512	256	0,00195313	1,5975613	0,823541	1,5983319	0,0001003
1024	512	0,00097656	1,5979170	0,914376	1,5982958	0,0000232
2048	1024	0,00048828	1,5981000	0,958493	1,5982885	0,0000055

		1				
$n_x$	$n_y$	h	I <sub>sp</sub>	$p_U$	$I_{sp\infty}$	U <sub>C</sub>
4	2	0,25000000	240,6040	não se aplica	não se aplica	não se aplica
8	4	0,12500000	263,0002	não se aplica	não se aplica	não se aplica
16	8	0,06250000	277,6878	0,608651	299,0243	6,6489
32	16	0,03125000	286,8618	0,678987	299,0808	3,0451
64	32	0,01562500	292,1666	0,790228	298,4558	0,9843
128	64	0,00781250	295,0521	0,878509	298,2155	0,2779
256	128	0,00390625	296,5641	0,932302	298,1525	0,0763
512	256	0,00195313	297,3395	0,963599	298,1352	0,0203
1024	512	0,00097656	297,7323	0,980820	298,1305	0,0053
2048	1024	0,00048828	297,9301	0,989966	298,1293	0,0014

Tabela A.9: Resultados do impulso específico no vácuo  $(I_{sp})$  para o escoamento invíscido congelado obtidos com malha concentrada na garganta na direção axial para os parâmetros físicos e geométricos apresentados na Tab. 5.1.

# APÊNDICE B – Leituras do gráfico do trabalho de Back, Massier e Gier (1965)

 Tabela B.1: Coordenadas na direção axial (em polegadas) obtidas do gráfico do artigo de Back,

 Massier e Gier (1965).

ponto	medida 1	medida 2	medida 3	medida 4	medida 5
1	0,807930	0,794931	0,804990	0,794211	0,799831
2	1,017898	1,008452	1,020803	1,007653	1,010153
3	1,192877	1,178471	1,189948	1,179610	1,181959
4	1,394085	1,384043	1,394061	1,387184	1,386343
5	1,752750	1,741824	1,749830	1,742950	1,741796
6	1,936285	1,927299	1,933387	1,927314	1,925376
7	2,090513	2,084934	2,090532	2,082280	2,082236
8	2,255384	2,232882	2,249559	2,245858	2,247570
9	2,448986	2,449837	2,448987	2,448182	2,447087
10	2,462955	2,462564	2,462946	2,461671	2,461642
11	2,648917	2,642085	2,646005	2,637193	2,634956
12	2,680709	2,679124	2,677765	2,676416	2,673345
13	2,808677	2,810988	2,808670	2,810814	2,809464
14	3,106038	3,111256	3,108937	3,104614	3,108588
15	3,615593	3,614003	3,615608	3,613638	3,611840
16	3,953486	3,953300	3,956385	3,949713	3,952320
17	4,606304	4,600983	4,606296	4,600126	4,600870
18	5,276762	5,274643	5,276764	5,273808	5,276130
19	5,985320	5,992092	5,985322	5,991529	5,989973
20	6,664809	6,666207	6,664798	6,667473	6,665350

ponto	medida 1	medida 2	medida 3	medida 4	medida 5
1	1,000910	1,000619	0,999346	1,000806	1,000087
2	0,998737	0,999136	0,997892	0,999156	0,999351
3	0,997296	0,997647	0,996433	0,997384	0,997854
4	0,994382	0,994650	0,992762	0,994201	0,994843
5	0,988545	0,989656	0,988368	0,990692	0,990333
6	0,973801	0,974042	0,975093	0,974552	0,975948
7	0,949444	0,952369	0,950738	0,952261	0,951704
8	0,854874	0,861573	0,855481	0,860245	0,857711
9	0,530451	0,532139	0,530539	0,531799	0,533245
10	0,488325	0,488751	0,487704	0,489382	0,490032
11	0,240027	0,241551	0,240309	0,241222	0,242893
12	0,220078	0,220871	0,218155	0,223141	0,222428
13	0,194976	0,196672	0,194536	0,196241	0,197423
14	0,185430	0,185110	0,184228	0,185728	0,185325
15	0,126410	0,127161	0,127412	0,127322	0,127002
16	0,096179	0,095424	0,094952	0,096463	0,095197
17	0,060840	0,060199	0,060309	0,060457	0,061150
18	0,035113	0,035574	0,035269	0,035892	0,035446
19	0,021959	0,022055	0,022050	0,022070	0,021877
20	0,015450	0,015088	0,014736	0,015707	0,015885

Tabela B.2: Pressões (adimensionalizadas pela pressão de estagnação 250,2 *psia*) obtidas do gráfico do artigo de Back, Massier e Gier (1965).

### ANEXO A – Coeficientes usados para determinação das propriedades termoquímicas

Tabela A.1: Coeficientes  $(\hat{a}_i)$  usados para determinação das propriedades termoquímicas das espécies para temperatura menor do que 1000 *K* [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)].

	<b>1</b>	-		
Espécie	$\hat{a}_1$	$\hat{a}_2$	$\hat{a}_3$	$\hat{a}_4$
$H_2O$	$4,19864056 \cdot 10^{0}$	$-2,03643410 \cdot 10^{-3}$	$6,52040211 \cdot 10^{-6}$	$-5,48797062 \cdot 10^{-9}$
$O_2$	$3,78245636 \cdot 10^{0}$	$-2,99673415 \cdot 10^{-3}$	$9,84730200 \cdot 10^{-6}$	$-9,\!68129508\cdot 10^{-9}$
$H_2$	$2,34433112 \cdot 10^{0}$	$7,98052075 \cdot 10^{-3}$	$-1,94781510 \cdot 10^{-5}$	$2,01572094 \cdot 10^{-8}$
OH	$3,99201543 \cdot 10^{0}$	$-2,40131752 \cdot 10^{-3}$	$4,61793841 \cdot 10^{-6}$	$-3,88113333 \cdot 10^{-9}$
0	$3,16826710 \cdot 10^{0}$	$-3,27931884 \cdot 10^{-3}$	$6,64306396 \cdot 10^{-6}$	$-6,12806624 \cdot 10^{-9}$
Н	$2,50000000 \cdot 10^{0}$	$0,00000000 \cdot 10^{0}$	$0,00000000 \cdot 10^{0}$	$0,00000000 \cdot 10^{0}$
Espécie	$\hat{a}_5$	$\hat{a}_6$	â7	
$H_2O$	$1,77197817 \cdot 10^{-12}$	$-3,02937267 \cdot 10^4$	$-8,49032208 \cdot 10^{-1}$	
$O_2$	$3,24372836 \cdot 10^{-12}$	$-1,06394356 \cdot 10^{3}$	$3,65767573 \cdot 10^{0}$	
$H_2$	$-7,37611761 \cdot 10^{-12}$	$-9,17935173 \cdot 10^{2}$	$6,83010238\cdot 10^{-1}$	
OH	$1,36411470 \cdot 10^{-12}$	$3,61508056 \cdot 10^3$	$-1,03925458 \cdot 10^{-1}$	
0	$2,11265971 \cdot 10^{-12}$	$2,91222592 \cdot 10^4$	$2,05193346 \cdot 10^{0}$	
Н	$0,00000000 \cdot 10^0$	$2,54736599 \cdot 10^4$	$-4,46682853\cdot 10^{-1}$	

Tabela A.2: Coeficientes  $(\hat{a}_i)$  usados para determinação das propriedades termoquímicas das espécies para temperatura maior ou igual a 1000 *K* [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)].

	1	υ ι	,	( )]
Espécie	$\hat{a}_1$	$\hat{a}_2$	â3	$\hat{a}_4$
$H_2O$	$2,67703787 \cdot 10^{0}$	$2,97318329 \cdot 10^{-3}$	$-7,73769690 \cdot 10^{-7}$	$9,44336689 \cdot 10^{-11}$
$O_2$	$3,66096083 \cdot 10^{0}$	$6,56365523\cdot 10^{-4}$	$-1,41149485 \cdot 10^{-7}$	$2,05797658 \cdot 10^{-11}$
$H_2$	$2,93286579 \cdot 10^{0}$	$8,26607967\cdot 10^{-4}$	$-1,46402335 \cdot 10^{-7}$	$1,54100359 \cdot 10^{-11}$
ОН	$2,83864607 \cdot 10^{0}$	$1,10725586 \cdot 10^{-3}$	$-2,93914978 \cdot 10^{-7}$	$4,20524247 \cdot 10^{-11}$
0	$2,54363697 \cdot 10^{0}$	$-2,73162486 \cdot 10^{-5}$	$-4,19029520\cdot 10^{-9}$	$4,95481845 \cdot 10^{-12}$
Н	$2,50000286 \cdot 10^{0}$	$-5,\!65334214\cdot 10^{-9}$	$3,63251723 \cdot 10^{-12}$	$-9,19949720 \cdot 10^{-16}$
Espécie	$\hat{a}_5$	$\hat{a}_6$	$\hat{a}_7$	
$H_2O$	$-4,26900959 \cdot 10^{-15}$	$-2,98858938 \cdot 10^4$	$6,88255571 \cdot 10^0$	
$O_2$	$-1,29913248 \cdot 10^{-15}$	$-1,21597725 \cdot 10^{3}$	$3,\!41536184\cdot10^{0}$	
$H_2$	$-6,88804432 \cdot 10^{-16}$	$-8,13065597 \cdot 10^2$	$-1,02432887 \cdot 10^{0}$	
OH	$-2,42169092 \cdot 10^{-15}$	$3,94395852 \cdot 10^3$	$5,84452662 \cdot 10^{0}$	
0	$-4,79553694 \cdot 10^{-16}$	$2,92260120 \cdot 10^4$	$4,92229457 \cdot 10^{0}$	
Н	$7,95260746 \cdot 10^{-20}$	$2,54736589 \cdot 10^4$	$-4,46698494 \cdot 10^{-1}$	

### ANEXO B – Coeficientes usados para determinação da condutividade térmica

Tabela B.1: Coeficientes  $(\hat{a}_i)$  usados para determinação da condutividade térmica  $(\kappa)$  das espécies para temperatura menor que 1000*K* [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)].

Espécie	$\hat{a}_1$	$\hat{a}_2$	â <sub>3</sub>	$\hat{a}_4$
$H_2O$	0,79349503	-1334,0063	378643,27	2,3591474
$O_2$	0,80805788	119,82181	-47335,931	0,95189193
$H_2$	0,74368397	$-549,\!41898$	256763,76	3,5553997
Н	0,51631898	$-1461,\!3202$	714461,41	5,5877786
0	0,79819261	179,70493	-52900,889	1,1797640
ОН	0,58415552	-875,33541	208305,03	3,5371017

Tabela B.2: Coeficientes  $(\hat{a}_i)$  usados para determinação da condutividade térmica  $(\kappa)$  das espécies para temperatura maior ou igual a 1000 *K* [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)].

Espécie	$\hat{a}_1$	$\hat{a}_2$	â <sub>3</sub>	$\hat{a}_4$
$H_2O$	1,5541443	66,106305	5596,9886	-3,9259598
$O_2$	0,81595343	-34,366856	2278,5080	1,0050999
$H_2$	0,93724945	190,13311	-19701,961	1,7545108
Н	0,58190587	46,941424	$-6875,\!9582$	4,3477961
0	0,73824503	11,221345	3166,8244	1,7085307
ОН	1,0657500	45,300526	-3725,7802	$-0,\!49894757$

## ANEXO C – Coeficientes usados para determinação da viscosidade

Tabela C.1: Coeficientes  $(\hat{a}_i)$  usados para determinação da viscosidade  $\mu$  das espécies para temperatura menor do que 1000*K* [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)].

Espécie	$\hat{a}_1$	$\hat{a}_2$	â <sub>3</sub>	$\hat{a}_4$
$H_2O$	0,50714993	-689,66913	87454,750	3,0285155
$O_2$	0,63839563	-1,2344438	$-22885,\!810$	1,8056937
$H_2$	0,70504381	36,287686	$-7225,\!5550$	0,41921607
Н	0,51631898	$-1461,\!3202$	714461,41	2,1559015
0	0,79832550	180,39626	-53243,244	0,51131026
ОН	0,58936635	-362,23418	23355,306	2,2363455

Tabela C.2: Coeficientes  $(\hat{a}_i)$  usados para determinação da viscosidade  $\mu$  das espécies para temperatura maior ou igual a 1000*K* [Fonte: McBride, Gordon e Reno (1993)].

Espécie	$\hat{a}_1$	$\hat{a}_2$	$\hat{a}_3$	$\hat{a}_4$
$H_2O$	0,78387780	-382,60408	49040,158	0,85222785
$O_2$	0,61936357	$-44,\!608607$	-1346,0714	1,9597562
$H_2$	0,68887644	4,8727168	-595,65053	0,55569577
Н	0,58190587	46,941424	$-6875,\!9582$	0,91591909
0	0,73101989	6,0468346	3563,0372	1,0955772
ОН	0,78530133	-165,24903	12621,544	0,69788972

#### ANEXO D – Propriedades termofísicas do ar

 $c_p(J/kg \cdot K)$ T(K) $\kappa(W/m \cdot K)$  $\mu(Pa \cdot s)$ 100  $0,711 \cdot 10^{-5}$ 1032 0,00934  $1,034 \cdot 10^{-5}$ 150 1012 0,01380 200 1007  $1,325 \cdot 10^{-5}$ 0,01810  $1,596 \cdot 10^{-5}$ 250 1006 0,02230 300 1007  $1.846 \cdot 10^{-5}$ 0.02630  $2,082 \cdot 10^{-5}$ 350 1009 0,03000  $2,301 \cdot 10^{-5}$ 400 1014 0,03380 450 1021  $2.507 \cdot 10^{-5}$ 0,03730  $2,701 \cdot 10^{-5}$ 500 1030 0,04070  $2,884 \cdot 10^{-5}$ 550 1040 0,04390  $3,058 \cdot 10^{-5}$ 600 1051 0,04690  $3,225 \cdot 10^{-5}$ 650 1063 0,04970  $3,388 \cdot 10^{-5}$ 700 1075 0,05240  $3,546 \cdot 10^{-5}$ 750 1087 0,05490  $3,698 \cdot 10^{-5}$ 800 1099 0,05730  $3,843 \cdot 10^{-5}$ 850 1110 0,05960  $3,\!981\cdot10^{-5}$ 900 1121 0,06200  $4,\!113\cdot10^{-5}$ 950 1131 0,06430 1000 1141  $4,244 \cdot 10^{-5}$ 0,06670  $4,490 \cdot 10^{-5}$ 1100 1159 0,07150  $4,\!730\cdot10^{-5}$ 1200 1175 0,07630  $4,960 \cdot 10^{-5}$ 1300 1189 0,08200  $5.300 \cdot 10^{-5}$ 1400 1207 0,09100  $5,570 \cdot 10^{-5}$ 1500 1230 0,10000  $5,840 \cdot 10^{-5}$ 1248 0,10600 1600  $6,110 \cdot 10^{-5}$ 1700 1267 0,11300 1800 1286  $6,370 \cdot 10^{-5}$ 0,12000  $6{,}630\cdot10^{-5}$ 1900 1307 0,12800  $6{,}890\cdot10^{-5}$ 20001337 0,13700  $7.150 \cdot 10^{-5}$ 2100 1372 0,14700 1417  $7,400 \cdot 10^{-5}$ 0,16000 2200  $7,660 \cdot 10^{-5}$ 2300 1478 0,17500  $7,920 \cdot 10^{-5}$ 2400 1558 0,19600  $8,180 \cdot 10^{-5}$ 2500 1665 0,22200  $9,550 \cdot 10^{-5}$ 3000 2726 0,48600

Tabela D.1: Propriedades termofísicas do ar à pressão atmosférica [Fonte: Incropera e DeWitt (1998)].