

CÁLCULO DE UN FRENTE DE LLAMA LAMINAR POR UN MÉTODO ESPECTRAL DE COLOCACIÓN

P. CALVO

y
F. PÉTRIZ

*Dpto. de Mat. Aplicada, Univ. Zaragoza,
Centro Politécnico Superior, María de Luna, 3,
50015 Zaragoza.*

RESUMEN

Se aborda el cálculo de un frente de llama unidimensional que se propaga en un gas comburente que contiene una cierta cantidad de combustible. Los problemas más destacables que aparecen en la resolución numérica de este tipo de sistemas se deben principalmente a la fuerte no linealidad introducida por la ley de Arrhenius. Esta ley conduce a importantes gradientes que se corresponden físicamente con el hecho de que la reacción se produce en una franja del espacio muy estrecha. En el presente trabajo se propone un método espectral de colocación que permite superar esta dificultad, y está basado en la descomposición del espacio en dos subdominios que se adaptan a la situación física de la reacción, aproximando convenientemente la solución.

SUMMARY

A one-dimensional plane flame computation is carried out. The plane flame is propagating in a gaseous medium containing only a small amount of reacting gas. The non-linearity of Arrhenius law introduces the main difficulty due to the presence of high-gradients in the solution. Physically, this fact means that the reaction is produced in a small region. In this work a spectral collocation method is proposed to avoid this problem. It is based in a domain decomposition adapted to the physical situation of the flame. This allows a good profile resolution.

DEFINICIÓN DE VARIABLES

ρ	densidad [kg/m^3]
C_p	capacidad calorífica a presión constante [$J/kg\ ^\circ K$]
D	coeficiente de difusión [m^2/s]
λ	coeficiente de conductividad térmica [$J/^\circ Kms$]
t	tiempo [s]
T	temperatura [$^\circ K$]

Recibido: Octubre 1992

T_b, T_u	temperatura región quemada (burned) y no quemada (unburned) [$^{\circ}\text{K}$]
V	velocidad del fluido [m/s^2]
Q	calor de reacción [J/kg]
Y	fracción másica del reactivo [1]
Y_b, Y_u	fracción másica región quemada (burned) y no quemada (unburned) [1]
Le	número de Lewis [$Le = \lambda/\rho C_p D$]
R^0	constante universal de los gases [$\text{J}/\text{kg } ^{\circ}\text{K}$]
A	constante ecuación de Arrhenius
B	factor de frecuencia [s^{-1}]
E	energía de activación [J/kg]
t_0	tiempo característico [$t_0 = \lambda/\rho U^2 C_p$]
l_0	longitud característica [$l_0 = \lambda/\rho U C_p$]
Θ	temperatura adimensional [1]
Ψ	concentración del reactivo adimensional [$\Psi = (Y - Y_u)/(Y_b - Y_u)$]
α	parámetro de expansión térmica (≈ 0.8)
β	número de Zeldovich [$\beta = (E/R^0 T_b^2)(T_b - T_u)$]
w	grado de reacción según la ley de Arrhenius [$\text{kg}/\text{m}^3 \text{s}$]
ω	grado de reacción ecuación adimensional
u	velocidad de propagación del frente de llama [m/s]
$\bar{u}_i$	coeficiente i -ésimo de Chebychev
D_{kl}^1, D_{kl}^2	operadores derivada primera y segunda respectivamente
x_i^l, x_i^D	punto de colocación i -ésimo correspondiente al dominio izquierdo y derecho
ε_0	grado de tolerancia en la resolución del sistema [$\approx 10^{-5}$]
ξ	variable independiente en el dominio de Chebychev

INTRODUCCIÓN

El problema a estudiar se corresponde con una situación ideal que considera un medio infinito compuesto por un gas a presión constante que contiene una cierta cantidad de reactivo. Este medio infinito se divide en dos partes por un frente de llama que se propaga en la dirección x a velocidad u , siendo ésta la única dirección en la que aparecen variaciones, dejando tras de sí los gases quemados y por delante la mezcla fresca. Dado que el medio es infinito no existe transporte neto de calor ni difusión química en direcciones perpendiculares a x .

Teniendo en cuenta estas consideraciones y tomando la densidad constante a través del frente de llama, las ecuaciones que rigen el comportamiento del sistema son la ecuación del calor y la ecuación de conservación de las especies químicas

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p V \frac{\partial T}{\partial x} &= \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Qw \\ \rho \frac{\partial Y}{\partial t} + \rho V \frac{\partial Y}{\partial x} &= \frac{\lambda}{C_p Le} \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} - w \end{aligned} \quad (1)$$

donde las variables han sido definidas anteriormente con sus correspondientes unidades.

Por último se considera que el grado de reacción w sigue la ley de Arrhenius expresada como

$$w = \rho B Y \exp\left(-\frac{E}{R^0 T}\right) \quad (2)$$

ADIMENSIONALIZACIÓN

Por conveniencia y para mayor generalidad de los resultados se adimensionalizan las ecuaciones. Los subíndices “ b ” y “ u ” corresponden a la región quemada (burned) y no quemada (unburned) respectivamente, pudiendo deducirse T_b (temperatura adiabática de la llama), como $T_b = T_u + (Q/C_p)Y_u$. Para llevar a cabo la adimensionalización se toma como tiempo característico $t_0 = \lambda/\rho U^2 C_p$ y como longitud característica $l_0 = \lambda/\rho U C_p$. La temperatura se representará a través de la variable θ definida como $\theta = (T - T_u)/(T_b - T_u)$ y del mismo modo la concentración mediante la variable Ψ definida como $\Psi = (Y - Y_u)/(Y_b - Y_u)$. El parámetro θ varía entre 0, temperatura de la mezcla fresca, y 1, temperatura de los gases después de la combustión, ya que al ser un proceso adiabático, la temperatura final de la combustión es T_b definida antes, mientras que Ψ varía entre 1, concentración de la mezcla fresca, y 0, concentración del reactivo tras la combustión total.

Adimensionalizando las ecuaciones (1) y (2) y considerando la derivada sustancial calculada con la velocidad del fluido V , se tiene

$$\begin{aligned} \frac{D\theta}{Dt} &= \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + w \\ \frac{D\Psi}{Dt} &= \frac{1}{Le} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - w \\ w &= A \beta^2 \Psi \exp\left(\frac{\beta(\theta - 1)}{1 + \alpha(\theta - 1)}\right) \end{aligned} \quad (3)$$

donde se ha tomado $\alpha = (T_b - T_u)/T_b$, $\beta = E(T_b - T_u)/R^0 T_b^2$ y A se define como

$$A = \frac{\lambda \rho B}{(\rho U)^2 C_p} \frac{e^{\left(-\frac{E}{R^0 T_b}\right)}}{\beta^2} \quad (4.a)$$

No obstante en vez de utilizar esta expresión de A , se utilizará una aproximación de primer orden de la forma

$$A = \frac{1}{2Le} \quad (4.b)$$

Algunos autores³ han resuelto este sistema dependiente del tiempo considerando ciertas condiciones iniciales, dejándolo evolucionar durante un tiempo según un método de integración (Runge-Kutta p. ej.) hasta que se estabiliza la forma de los perfiles de

temperaturas y concentraciones, y tomando en este momento una instantánea de la zona desplazada una distancia ut , siendo u la velocidad de propagación.

En nuestro caso se ha optado por expresar las ecuaciones en una referencia móvil que se desplaza con la velocidad del frente de llama u . Expresando la derivada sustancial en función de la velocidad u (con u velocidad de propagación de derecha a izquierda), las ecuaciones (3) pueden escribirse en la forma:

$$\begin{aligned} -u \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + w \\ -u \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= \frac{1}{Le} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - w \end{aligned} \quad (5)$$

ya que los términos $\partial \theta / \partial t$ y $\partial \Psi / \partial t$ son nulos en la referencia móvil tomada.

Observando las ecuaciones vemos que en el caso $Le = 1$ resulta $\Psi = 1 - \theta$. Esto implica que en este caso particular bastará resolver la ecuación de la temperatura.

Integrando entre $-\infty$ y $+\infty$ cualquiera de las dos ecuaciones tenemos u en función de w a través de la relación

$$u = - \int_{-\infty}^{+\infty} w dx \quad (6)$$

Como se muestra en la Figura 1 en la que se representa la solución para el caso $\beta = 10$, $Le = 1$, se comprueba que hay dos zonas. En la zona izquierda no se ha llegado a iniciar la combustión ($w = 0$) ya que no se ha alcanzado todavía la temperatura necesaria; por ello, los fenómenos que tienen mayor relevancia son los difusivos.

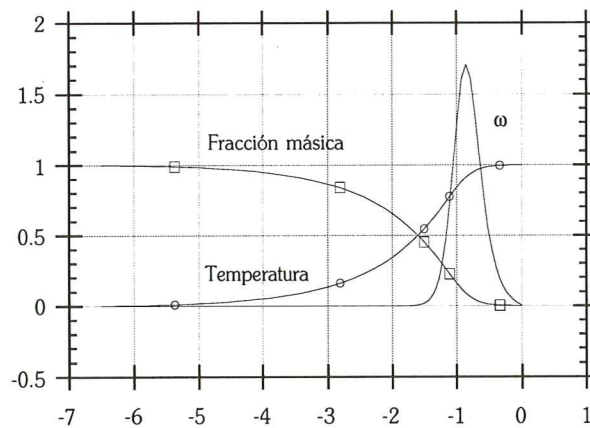


Figura 1. Perfiles correspondientes a $Le = 1$, $\beta = 10$.

El consumo de reactivo representado por el término independiente w se produce en una estrecha región (la de la derecha donde $w \neq 0$) que produce una difusión de reactivos desde la zona de mezcla fresca hacia la llama. Igualmente, la mezcla fresca ve incrementada su temperatura por difusión desde el frente de llama, elevando

la temperatura hasta que la mezcla supera la energía de activación que produce la combustión manteniendo así la llama.

Estas dos zonas se corresponderán con lo que serán los dos subdominios en los que está descompuesto el dominio global. Sobre el dominio izquierdo se impondrán las condiciones de contorno correspondientes a la mezcla fresca $(-\infty)$ y en él, las funciones que se aproximan son suaves y representan un fenómeno de difusión. Por otra parte, sobre el subdominio derecho se definirán las condiciones de contorno de los gases quemados $(+\infty)$ y en él, las aproximaciones requerirán un número mayor de nodos dado que w presenta mayores gradientes, y ofrece más dificultad por su forma puntiaguda.

APROXIMACIÓN DE LAS FUNCIONES

Para la aproximación de las funciones de temperatura y concentración, se utilizarán polinomios de Chebychev de la forma

$$T_k(\xi) = \arccos(k \cos \xi) \quad \xi \in \Omega \quad \text{con } \Omega =]-1, 1[\quad (7)$$

pudiendo expresar una función φ definida en Ω como

$$\varphi(\xi) = \sum_k \bar{u}_k T_k(\xi) \quad (8)$$

Dado el sistema discretizado en los puntos de colocación $\xi_i = \cos(i\pi/N)$ $i = 0, 1, \dots, N$, existe una versión discreta del operador derivada tal que $u'_k = \mathbf{D}_{kl}^1 u_l$

$$\mathbf{D}_{kl}^1 = \begin{cases} (\bar{c}_k/\bar{c}_l)(-1)^{k+1}/(x_k - x_l), & 0 \leq k, l \leq N; l \neq k \\ -x_l/[2(1 - x_l^2)], & 1 \leq k = l \leq N-1 \\ (2N^2 + 1)/6, & k = l = 0 \\ -(2N^2 + 1)/6, & k = l = N \end{cases} \quad (9)$$

siendo

$$\bar{c}_k = \begin{cases} 2 & \text{si } k = 0 \text{ ó } N \\ 1 & \text{si } 1 \leq k \leq N-1 \end{cases} \quad (10)$$

La derivada segunda se puede calcular, o bien como $\mathbf{D}_{kl}^2 = \mathbf{D}_{km}^1 \mathbf{D}_{ml}^1$, o bien utilizando una definición explícita que reduce considerablemente tanto el tiempo de cálculo evitando el producto de matrices como los errores de redondeo, origen de ciertos problemas de sobreoscilación en los contornos como se expone en los trabajos de Kenneth et al.²:

$$\mathbf{D}_{kl}^2 = \begin{cases} [(-1)^{k+1}/\bar{c}_k] [x_k^2 + x_k x_l - 2]/[(1 - x_k^2)(x_k - x_l)^2], & 1 \leq k \leq N-1 \\ & 1 \leq l \leq N-1; l \neq k \\ 0.5 [(-1)^{k+1}/\bar{c}_k] [x_k^2 + x_k x_l - 2]/[(1 - x_k^2)(x_k - x_l)^2], & k = 1, \dots, N-1; l = 0, N \\ -[(N^2 - 1)(1 - x_k^2) + 3]/[3(1 - x_k^2)^2], & 1 \leq k = l \leq N-1, \\ (2/3)[(-1)^l/\bar{c}_l][(2N^2 + 1)(1 - x_l) - 6]/(1 - x_l)^2, & k = 0; 1 \leq l \leq N \\ (2/3)[(-1)^{N+1}/\bar{c}_l][(2N^2 + 1)(1 - x_l) - 6]/(1 - x_l)^2, & k = N; 0 \leq l \leq N-1 \\ (N^4 - 1)/15, & k = l = 0 = N \end{cases} \quad (11)$$

Tomando θ y Ψ discretizados con N puntos en cada subdominio y expresados vectorialmente como $\theta_l^i = (\theta_0^i, \theta_1^i, \dots, \theta_N^i)^T$; $\Psi_l^i = (\Psi_0^i, \Psi_1^i, \dots, \Psi_N^i)^T$ donde i indica el subdominio $i = I, D$ (izquierda y derecha), se puede escribir el sistema de ecuaciones resultante del siguiente modo

$$\begin{aligned} -u\mathbf{D}_{kl}^1\theta_l^i - \mathbf{D}_{kl}^2\theta_l^i &= \left[-u\mathbf{D}_{kl}^1 - \mathbf{D}_{kl}^2\right]\theta_l^i = w^i(x_k) \\ -u\mathbf{D}_{kl}^1\Psi_l^i - \frac{1}{Le}\mathbf{D}_{kl}^2\Psi_l^i &= \left[-u\mathbf{D}_{kl}^1 - \frac{1}{Le}\mathbf{D}_{kl}^2\right]\Psi_l^i = -w^i(x_k) \end{aligned} \quad (12)$$

Sin embargo cada subdominio está definido entre x_0^i y x_N^i $i = I, D$ y no necesariamente de -1 a 1. Para ello definimos los siguientes cambios de variable

$$x = \phi(\xi), \quad \phi^i = \gamma^i \frac{1 + \xi}{2} + x_0^i; \quad \gamma^i = x_N^i - x_0^i \quad (13)$$

que modifica las expresiones de las derivadas en la forma

$$\begin{aligned} x &= \phi(\xi) & dx &= \phi'(\xi)d\xi \\ \frac{d\phi}{dx} &= \frac{d\phi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} \\ \frac{d^2\phi}{dx^2} &= \frac{d}{dx} \left(\frac{d\phi}{dx} \right) = \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^2 \end{aligned} \quad (14)$$

con ello resulta el sistema definitivo

$$\begin{aligned} \left[-u \frac{d\xi}{dx} \Big|_{x=x_k^i} \mathbf{D}_{kl}^1 - \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^2 \Big|_{x=x_k^i} \mathbf{D}_{kl}^2 \right] \theta_l^i &= w^i(x_k) \\ \left[-u \frac{d\xi}{dx} \Big|_{x=x_k^i} \mathbf{D}_{kl}^1 - \frac{1}{Le} \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^2 \Big|_{x=x_k^i} \mathbf{D}_{kl}^2 \right] \Psi_l^i &= -w^i(x_k) \end{aligned} \quad (15)$$

RESOLUCIÓN

Debido a la no linealidad del sistema $w = w(\theta, \Psi)$, el cálculo se ha realizado tomando un perfil basado en resultados asintóticos como suposición inicial del método iterativo a aplicar, utilizando los superíndices para indicar el número de iteración

$$\begin{aligned}
 \theta^0(x) &= e^x & \text{si } x \leq 0 \\
 \theta^0(x) &= 1 & \text{cualquier otro caso} \\
 \Psi^0(x) &= 1 - e^x & \text{si } x \leq 0 \\
 \Psi^0(x) &= 0 & \text{cualquier otro caso}
 \end{aligned} \tag{16}$$

A partir de θ^0 y Ψ^0 se tiene w^0 y u^0 lo que permite construir un sistema lineal de ecuaciones para valores de θ y Ψ considerando $w^0 = w(\theta^0, \Psi^0)$. Linealizando de esta forma, θ y Ψ quedan desacoplados. De este modo se puede resolver primero una variable y luego la otra consumiendo aproximadamente un 25% menos de memoria respecto a lo que supondría resolver el sistema completo.

Una vez obtenidos θ^n y Ψ^n mejores aproximaciones que los perfiles considerados en la iteración anterior, se obtiene nuevamente $w^n = w(\theta^n, \Psi^n)$ y u^n .

Este proceso iterativo se realiza hasta que el residuo bajo la norma euclídea verifica $\|\theta^n - \theta^{n+1}\| + \|\Psi^n - \Psi^{n+1}\| < \varepsilon_0$.

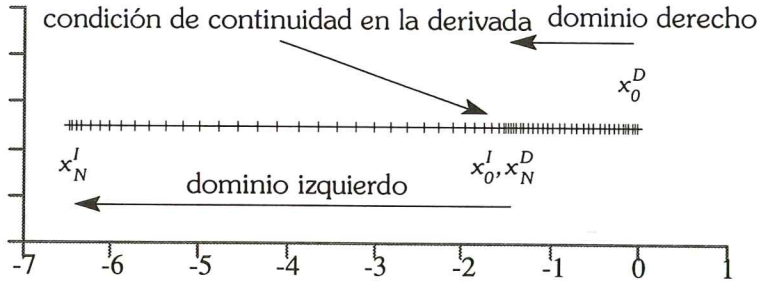


Figura 2. Esquema de discretización por dos dominios.

CONSTRUCCIÓN DE LA MATRIZ

Como ya se ha indicado, el dominio considerado se ha subdividido en 2 subdominios con un esquema que se corresponde a la Figura 2 y cuya distribución viene determinada por la fórmula (13) para los puntos de colocación $\xi_i = \cos(i\pi/N)$ $i = 0, 1, \dots, N$. A la hora de construir el sistema hay que tener cuidado al asignar cada variable en el lugar que le corresponde ya que los valores de x_i se distribuyen creciendo cuando ξ_i decrecen. Por esta razón, primero se impondrán las condiciones de contorno correspondientes a los extremos, esto es, x_0^D, x_N^I . Luego, se construye el operador diferencial discreto según la ecuación (15) y se ensambla para $x_1^D, \dots, x_{N-1}^D$ y $x_1^I, \dots, x_{N-1}^I$. La continuidad en la

solución viene impuesta a priori al considerar una sola variable. La condición que se impone como ecuación número N es la continuidad en la derivada según la ecuación

$$\mathbf{D}_{kl}^1 \phi_l^{der} \Big|_{l=N} - \mathbf{D}_{kl}^1 \phi_l^{izq} \Big|_{l=0} = 0 \quad (17)$$

La matriz definitiva tendrá la forma que aparece en la Figura 3 donde x representa bien θ o bien Ψ .

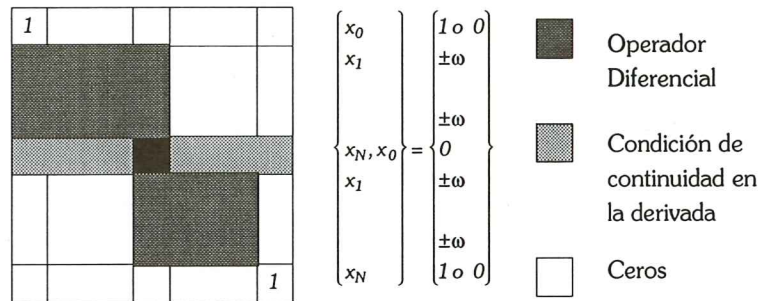


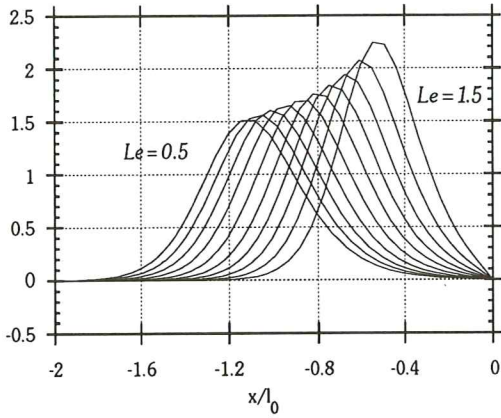
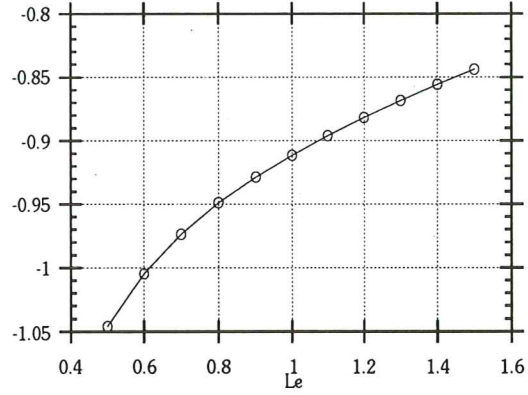
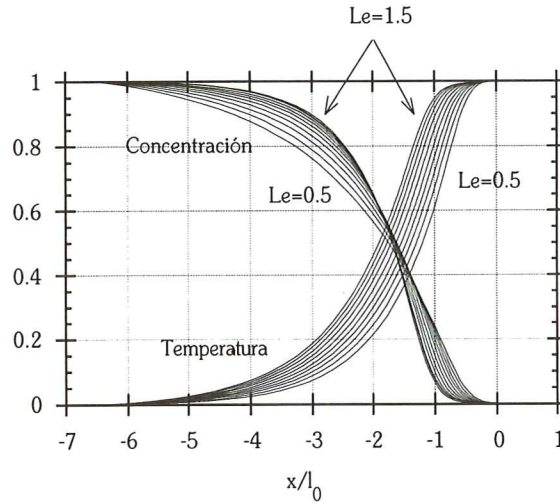
Figura 3. Esquema de montaje de la matriz.

LOCALIZACIÓN DE LOS EXTREMOS DE LOS SUBDOMINIOS

Queda por resolver la localización de los puntos extremos de los subdominios, $x_0^D, x_N^D = x_0^I, x_N^I$. Los extremos x_0^D, x_N^I que determinan los puntos donde se pueden considerar las condiciones en el infinito basta con situarlos “suficientemente alejados” entendiendo como tales los puntos que por el hecho de alejarlos más no modifican la solución ya que se sitúan fuera del alcance de los efectos de la llama. El mayor problema se encuentra en la localización del punto de separación de los dos subdominios. Para este punto se ha comprobado tras varios experimentos numéricos que una buena localización implica una rápida convergencia del método, y por otra parte, situado fuera de un pequeño intervalo que contiene puntos del dominio en los que w no es nulo, el método puede no converger, haciéndose más crítico en el caso de tener β valores altos, ya que ello implica reacciones más bruscas, en definitiva, valores de w más altos y con menos “base” (funciones más puntiagudas). En resumen, para obtener resultados satisfactorios, se ha comprobado que el subdominio de la derecha ha de aproximar toda la zona de $w \neq 0$ y nada más.

Con objeto de que el propio código localice un x_N^D apropiado se ha utilizado un algoritmo como el que sigue

- Proponer un x_N^D
- Realizar un cierto número de iteraciones que nos proporcionan una solución aproximada de $w \neq 0$.
- Localizar un punto en el que w obtenida en b) empiece a ser no nulo.
- Resolver el sistema para un ε .

Figura 4. $w = f(Le)$ para $\beta = 10$.Figura 5. $u = f(Le)$ para $\beta = 10$.Figura 6. Perfiles de temperaturas y concentraciones en función de Le para $\beta = 10$.

- e) Comprobar si es necesario encontrar un x_N^D mejor y en su caso volver a c).
- f) Sacar resultados numéricos.

RESULTADOS

Se han realizado distintos cálculos para rangos de β y Le amplios comprobando un buen comportamiento del método para valores de β bajos, y un comportamiento más inestable cuando β aumenta debiendo ser más cuidadosos a la hora de seleccionar x_N^D .

En la Figura 6 se representa una serie de perfiles de temperaturas y fracciones másicas que muestran el cambio producido en la llama al variar el número Le . El hecho de disminuir Le implica que los fenómenos de conducción son menos importantes (como se ve en la curva de temperaturas al ceñirse ésta al cero), y por el contrario, los

fenómenos difusivos son más relevantes, como sucede con la fracción másica que tiende a disminuir más, ya que el reactivo difunde antes hacia el núcleo de la llama. Para valores de Le bajos, igualmente, se adquieren velocidades más altas por tener un w mayor (mayor área).

Se presentan a continuación resultados en velocidades de propagación de llama obtenidos para distintos valores de β y Le por diferentes grupos de trabajo #1, #2, #3, #4, #5, resultados asintóticos⁴, y por nuestro método.

Grupo # / Caso	$Le = 2$ $\beta = 10$	$Le = 1$ $\beta = 10$	$Le = 0.5$ $\beta = 10$	$Le = 2$ $\beta = 20$	$Le = 1$ $\beta = 20$	$Le = 0.5$ $\beta = 20$
#1	0.849	0.918	0.959	Osc.	0.954	0.978
#2	0.708	0.894	0.968	0.569	0.903	0.968
#3	0.880	0.910	0.997	Osc.	no calc.	no calc.
#4	0.867	0.907	0.956	0.975	0.961	0.975
#5	0.842	0.915	1.100	Osc.	0.951	1.200
Asintóticos #1	0.842	0.908	0.949	0.911	0.973	0.951
Asintóticos #2	0.794	0.894	0.944	0.897	0.947	0.972
Nuestros res.	0.833	0.911	1.040	0.899	0.950	1.060

CONCLUSIONES

Se presenta un método de resolución del sistema diferencial de ecuaciones que rige el comportamiento de una llama. Debido a los fuertes gradientes que aparecen en la zona de la llama, frente al uso de distintas técnicas entre las que destaca el mapping con Runge-Kutta para poder obtener dominios móviles³ con distintos cambios de variable, se ha optado por tomar una referencia móvil que se mueve solidaria con la llama como técnica más adecuada.

Ha sido necesario un cambio de coordenadas que permite transformar el dominio de los polinomios de Chebychev para adaptarlos convenientemente a las variables representadas. Por último, los resultados obtenidos se han justificado físicamente y se han comparado éstos con los dados por otros autores.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido posible gracias a la colaboración de la Diputación General de Aragón que financia la beca del Consejo Asesor de Investigación.

REFERENCIAS

1. C. Canuto, M.Y. Husaini, A. Quarteroni y T.A. Zang, "Spectral Methods in Fluid Dynamics", *Springer Series in Computational Physics*, Springer-Verlag, (1988).
2. S. Kenneth, S. Breuer y R. Eversen, "On The Errors Incurred Calculating Derivatives Using Chebychev Polynomials", *Journal of Computational Physics*, Vol. **99**, pp. 56-67, (1992).
3. U. Ehrenstein, H. Guillard y R. Peyret, "Flame Computations by a Chebychev Multidomain Method", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. **9**, pp. 499-515, (1989).
4. N. Peter y J. Wamatz, "Numerical Methods in Laminar Flame Propagation", *Notes on Numerical Mechanics*, Vol. **6**, Vieweg, Branschweig, (1982).
5. W.B. Brush y F.E. Fendell, "Asymptotic Analysis of Laminar Flame Propagation for General Lewis Numbers", *Combustion Science and Technology*, Vol. **1**, pp. 421-428, (1970).
6. G. Carrier, F. Fendell, K. Chen y M. Vazirani, "Evaluating a Simple Model for Laminar Flame Propagations Rates, in Planar Geometry", *Computational Science and Technology*, pp. 207-227, (1991).