

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  $\theta$  definida como  $\theta = (T - T_u)/(T_b - T_u)$  y del mismo modo la concentración mediante la variable  $\Psi$  definida como  $\Psi = (Y - Y_u)/(Y_b - Y_u)$ . El parámetro  $\theta$  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  $\Psi$  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 autores<sup>3</sup> 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

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

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

pudiendo expresar una función  $\varphi$  definida en  $\Omega$  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.<sup>2</sup>:

### 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  $\theta^0$  y  $\Psi^0$  se tiene  $w^0$  y  $u^0$  lo que permite construir un sistema lineal de ecuaciones para valores de  $\theta$  y  $\Psi$  considerando  $w^0 = w(\theta^0, \Psi^0)$ . Linealizando de esta forma,  $\theta$  y  $\Psi$  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  $\theta^n$  y  $\Psi^n$  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  $\|\theta^n - \theta^{n+1}\| + \|\Psi^n - \Psi^{n+1}\| < \varepsilon_0$ .

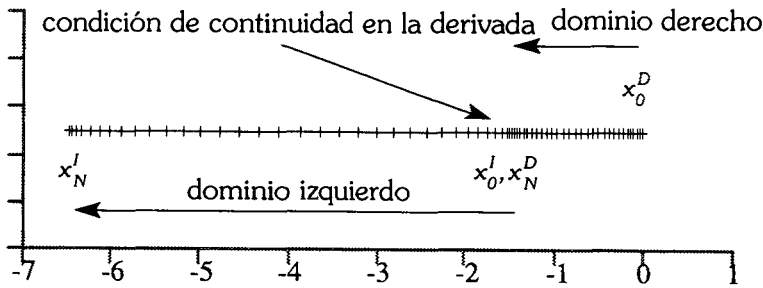


Figura 2. Esquema de discretización por dos dominios.

### 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  $\xi_i$  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

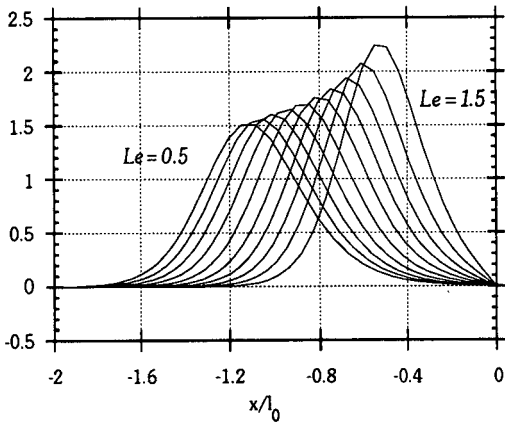


Figura 4.  $w = f(Le)$  para  $\beta = 10$ .

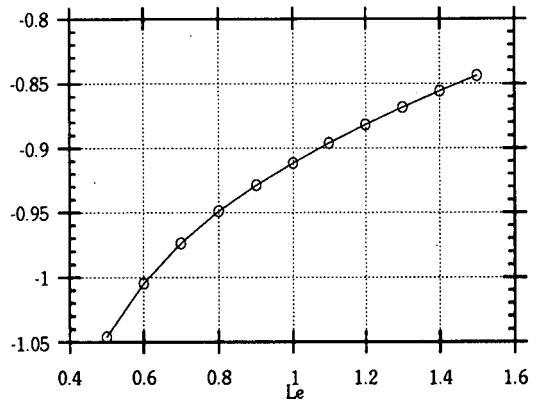


Figura 5.  $u = f(Le)$  para  $\beta = 10$ .

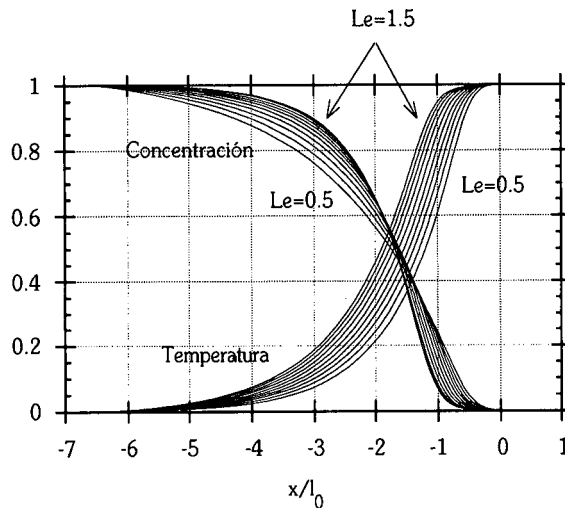


Figura 6. Perfiles de temperaturas y concentraciones en función de  $Le$  para  $\beta = 10$ .

- 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  $\beta$  y  $Le$  amplios comprobando un buen comportamiento del método para valores de  $\beta$  bajos, y un comportamiento más inestable cuando  $\beta$  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

## 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).