

ANÁLISIS COMPARATIVO SOBRE LA UTILIZACIÓN DE DIFERENTES MÉTODOS NUMÉRICOS EN LA DETERMINACIÓN DE LOS FRENTE Y PULSOS DE COMBUSTIÓN

Toni Pujol, Joaquim Fort*, Josep R González, Lino Montoro, Marc Pelegrí
Àrea de Mecànica de Fluids, Dept. d'EMCI, Escola Politècnica Superior, Edifici P-II Campus
Montilivi, Girona 17071

*Dept. de Física Escola Politècnica Superior, Edifici P-II Campus Montilivi, Girona 17071
Teléfono: +34 972 41 84 89 , Fax: +34 972 41 80 98
e-mail: toni.pujol@udg.edu

RESUMEN

La complejidad de los fenómenos de combustión se manifiesta no sólo por la necesidad de resolver la dinámica turbulenta de los fluidos implicados sino también por la determinación de las reacciones químicas que se producen. Recientemente, la aplicación de los métodos numéricos para analizar procesos de combustión se ha revelado como una técnica especialmente interesante (véase, e.g., Reddy y Gartling, 2000), ya que permite tratar problemas de una dimensión espacial y temporal, y de una complejidad matemática, que, por otra parte, serían inabordables desde un punto de vista casi-analítico.

Por ello, una gran variedad de autores han analizado las características de las diferentes técnicas numéricas como diferencias finitas, elementos finitos, etc., para determinar la eficiencia de cada una de ellas en la resolución de diversos problemas relacionados con la termodinámica técnica (e.g., Shih, 1984).

Aquí, y a diferencia de estudios anteriores, analizamos las soluciones asociadas a la evolución de frentes y pulsos de combustión obtenidas mediante la aplicación del método de diferencias finitas y el método de elementos finitos. Las características térmicas de los frentes y pulsos de combustión asociadas a cada método de solución son analizadas en detalle.

1. INTRODUCCIÓN

En esencia, los métodos numéricos están diseñados para proporcionar soluciones aproximadas a ecuaciones que no admiten resultados analíticos. De aquí proviene el interés del usuario en conocer la eficacia del método numérico empleado en la resolución de un determinado problema físico. Por ello, numerosos autores han llevado a cabo estudios sobre la precisión de diferentes métodos numéricos en una gran variedad de problemas de transferencia del calor (véase, e.g., Shih, 1984).

Sin embargo, en un proceso tan complejo como la combustión, donde intervienen una gran cantidad de ecuaciones no lineales, existen muy pocos estudios dedicados a analizar la bondad de los métodos numéricos aplicados. En esta comunicación presentamos un estudio comparativo de los dos métodos numéricos más usados para simular el fenómeno de la combustión: las diferencias finitas y los elementos finitos.

El modelo de combustión, basado en el expuesto en Fort et al. (2004), se describe brevemente en la sección 2. Los métodos comúnmente utilizados para resolver problemas numéricos en combustión aquí analizados: el método de diferencias finitas y el método de elementos finitos, se comentan en la sección 3. Los resultados se muestran en la sección 4. Finalizamos el presente estudio con la sección 5 dedicada a las conclusiones.

2. MODELO DE LLAMA PREMEZCLADA

Aquí utilizamos el simple modelo de llama premezclada utilizado por Fort et al. (2004), el cual no considera convección ni difusión de masa y asume una presión constante. De esta forma, la ecuación de evolución de la energía es,

$$\rho_0 c \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + QA\rho \left(e^{\frac{E_a}{RT}} - e^{\frac{E_a}{RT_0}} \right) - 4a\sigma(T^4 - T_0^4), \quad (1)$$

donde T es la temperatura de la llama esférica, c el calor específico, ρ_0 la densidad total (constante), λ la conductividad térmica (constante), Q la tasa de calor producida por la reacción de combustión por unidad de masa, A el factor preexponencial de la aproximación de Arrhenius con E_a la energía de activación, R la constante universal de los gases, T_0 la temperatura ambiente, a el coeficiente de absorción y σ la constante de Stefan-Boltzmann. En la ecuación (1), ρ es la densidad del combustible cuya ecuación de evolución es,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -A\rho \left(e^{\frac{E_a}{RT}} - e^{\frac{E_a}{RT_0}} \right). \quad (2)$$

El primer término del miembro de la derecha de la ecuación (1) corresponde al término de conducción, mientras que el penúltimo es el de reacción y el último el de pérdida de calor por emisión de radiación.

Por conveniencia, podemos expresar las ecuaciones (1) y (2) en términos de las siguientes variables y parámetros adimensionales,

$$\theta \equiv T \frac{R}{E_a}, \quad t' \equiv t \frac{RQA}{cE_a}, \quad r' \equiv r \sqrt{\frac{RQA\rho_0}{\lambda E_a}}, \quad \rho' \equiv \frac{\rho}{\rho_0}, \quad C \equiv \frac{cE_a}{RQ}, \quad \varepsilon \equiv \frac{4a\sigma}{QA\rho_0 E_a} \quad (3)$$

de donde se obtiene,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} + \rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) - \varepsilon (\theta^4 - \theta_0^4), \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t'} = -C\rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right). \quad (5)$$

Las ecuaciones (4) y (5) son las utilizadas para llevar a cabo el análisis comparativo de los métodos numéricos descritos en el siguiente apartado.

3. MÉTODOS NUMÉRICOS

A continuación describimos los fundamentos básicos de los dos métodos numéricos analizados en esta comunicación: el método de diferencias finitas (sección 3.1) y el método de elementos finitos (sección 3.2)

3.1 Método de diferencias finitas

Las diferencias finitas han tenido una gran aceptación como método numérico debido a la simplicidad en su concepto matemático. En efecto, la discretización del espacio reemplaza el dominio físico continuo por una red de puntos discretos a partir de los cuales se obtienen expresiones aproximadas para las derivadas truncando series de Taylor a un cierto orden (grado de precisión). Unos ejemplos sencillos de aproximación de derivadas primera y segunda empleando el método de diferencias finitas (Shih,1984) se muestra en la tabla 1, donde, por simplicidad, hemos supuesto un problema unidimensional con una discretización en puntos equidistantes una distancia h . El subíndice j en la tabla indica el valor de la variable en el punto j de la red.

Tabla 1. Ejemplo de aproximaciones en diferencias finitas de derivadas primera y segunda. El subíndice j indica la posición espacial dentro de la malla, con h la distancia entre dos nodos.

Derivada	Aproximación en diferencias finitas	Grado de precisión
$\frac{du}{dx}$	$\frac{u_{j+1} - u_j}{h}$ (avanzada)	$O(h)$
	$\frac{u_j - u_{j-1}}{h}$ (retrasada)	$O(h)$
	$\frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h}$ (central)	$O(h^2)$
$\frac{d^2u}{dx^2}$	$\frac{u_{j-2} - 8u_{j-1} + 8u_j - u_{j+2}}{12h}$ (central)	$O(h^4)$
	$\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2}$	$O(h^2)$
	$\frac{-u_{j-2} + 16u_{j-1} - 30u_j + 16u_{j+1} - u_{j+2}}{12h^2}$	$O(h^4)$

La ecuación 4 empleada en el modelo de llama premezclada se asemeja a una ecuación de difusión clásica. Aquí, la variable no solo depende del espacio sino también del tiempo. Por ello, la discretización en diferencias finitas se aplicará tanto para el primer término (tasa de variación de la temperatura) como del segundo (laplaciano de la temperatura).

La tabla 2 muestra algunos de los métodos más usados para resolver problemas en dos dimensiones (una espacial y una temporal). Aquí, el superíndice n indica el paso de tiempo. El modelo totalmente explícito es altamente inestable y requiere unos pasos de tiempo muy pequeños para obtener una solución correcta. Por otra parte, el modelo totalmente implícito produce unos resultados no adecuados, aunque sí estables. Por ello, aquí utilizamos la aproximación de Crank-Nicholson para expresar los términos de derivada temporal y de la laplaciana espacial.

Tabla 2. Ejemplo de diferentes métodos para aproximar una ecuación de difusión mediante diferencias finitas. El criterio de estabilidad es para una ecuación de difusión pura (sin términos de reacción)

Método*	Temporal	Difusión	Estabilidad
	$\frac{\partial u}{\partial t}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	
Ex.	$\frac{u_{j^{n+1}} - u_{j^n}}{\Delta t}$	$\frac{u_{j+1^n} - 2u_{j^n} + u_{j-1^n}}{(\Delta x)^2}$	$\frac{2\Delta t}{\Delta x} \leq 1$
Imp.	$\frac{u_{j^{n+1}} - u_{j^n}}{\Delta t}$	$\frac{u_{j+1^{n+1}} - 2u_{j^{n+1}} + u_{j-1^{n+1}}}{(\Delta x)^2}$	estable
C-N	$\frac{u_{j^{n+1}} - u_{j^n}}{\Delta t}$	$\frac{1}{2} \left(u_{j+1^{n+1}} - 2u_{j^{n+1}} + u_{j-1^{n+1}} \right) + \left(u_{j+1^n} - 2u_{j^n} + u_{j-1^n} \right)$	

Ex. = Explícito

Imp. = Implícito

C-N. = Crank-Nicholson (diferencias finitas centradas en el tiempo $n + 1/2$)

3.2 Método de elementos finitos

Aquí usamos el término de elementos finitos para designar el método numérico que consiste en subdividir el espacio físico en elementos y donde la solución se obtiene mediante un método variacional donde las funciones de forma se emplean, también, como funciones de peso (método de Galerkin).

En esencia, el método consiste en aproximar la función real $u(x)$ mediante una función aproximada $\tilde{u}(x)$ que se puede expresar como una combinación lineal de los valores en los nodos de los elementos

$$\tilde{u}(x) = \sum_{j=1}^n u_j N_j(x) \quad (6)$$

donde N_j son las funciones de forma y u_j corresponde al valor de la variable en los n nodos del elemento. De esta forma, nuestro objetivo es obtener los valores u_j que permitan resolver las siguientes ecuaciones variacionales aplicadas para cada uno de los elementos de que consta todo el dominio,

$$\int_{\Omega} N_j \left[\frac{\partial \theta}{\partial t'} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} - \rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) + \varepsilon (\theta^4 - \theta_0^4) \right] dx = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (7)$$

$$\int_{\Omega} N_j \left[\frac{\partial \rho'}{\partial t'} + C \rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) \right] dx = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (8)$$

donde las funciones de peso N_j son las mismas que las funciones de forma (método de Galerkin). Aquí, Ω corresponde al dominio de un determinado elemento.

En este estudio, las integraciones del término de reacción y de la pérdida de calor por radiación se han realizado numéricamente a partir de emplear dos puntos de Gauss dentro del dominio del elemento. Sin embargo, las integraciones del término de variación temporal y el relacionado con la laplaciana se han obtenido analíticamente mediante la utilización de elementos finitos lineales de dos nodos. Las funciones de forma para estos tipos de elementos se pueden obtener de Reddy (2006). Debido a que las simulaciones obtenidas para los elementos lineales de dos nodos son suficientemente precisas, no se ha considerado la utilización de elementos no lineales.

4. RESULTADOS

Se han realizado comparativas de los métodos numéricos arriba mencionados para los dos siguientes casos: frentes de propagación (sección 4.1) y pulsos (sección 4.2).

4.1 Frentes de propagación

Tal y como discute Fort et al. (2004), las ecuaciones (4) y (5) con $\varepsilon = 0$ (sin pérdidas de calor por radiación) conducen a unos frentes de llama que se propagan a una cierta velocidad. Aquí analizamos como se modifica el frente debido a la utilización de diferentes métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones del problema.

La tabla 3 contiene los casos analizados en función de la discretización temporal y espacial adimensional. Cabe destacar que tanto para el método de elementos finitos como para el de diferencias finitas, la discretización temporal sigue el esquema C-N de la tabla 2. Además, la discretización de la laplaciana sigue el mismo método en los dos casos (también C-N de la tabla 2). De esta forma, la única diferencia entre los dos métodos recae en la definición intrínseca del método (e.g., variacional vs. series de Taylor), pero no en el tipo de aproximación empleada para discretizar las derivadas parciales (tanto temporales como espaciales) en función de los valores de las variables en los nodos de la malla pues es la misma tanto para diferencias finitas como para elementos finitos.

Tabla 3. Resumen de los casos analizados en función de la discretización adimensional temporal y espacial

Caso	$\Delta t'$	$\Delta r'$	Iteraciones en el tiempo	Puntos
1	0,01	0,1	20000	5000
2	0,01	0,5	20000	1000
3	0,1	0,1	2000	5000
4	0,1	0,5	2000	1000

La figura 1 muestra el frente de la llama para un tiempo adimensional $t' = 180$ para los casos expuestos en la tabla 4. Como se observa en la figura, los resultados para elementos finitos solo varían en función del $\Delta t'$ y no del $\Delta r'$ (por supuesto, variarían en función de $\Delta r'$ si utilizáramos valores superiores al propuesto en la tabla 3). En comparación, los resultados obtenidos mediante el método de diferencias finitas sí que varían en función del $\Delta r'$ propuesto en la tabla 3. De esta forma se pone de manifiesto que

el método de elementos finitos, incluso para este tipo de problemas sencillos, es más robusto que el método de diferencias finitas.

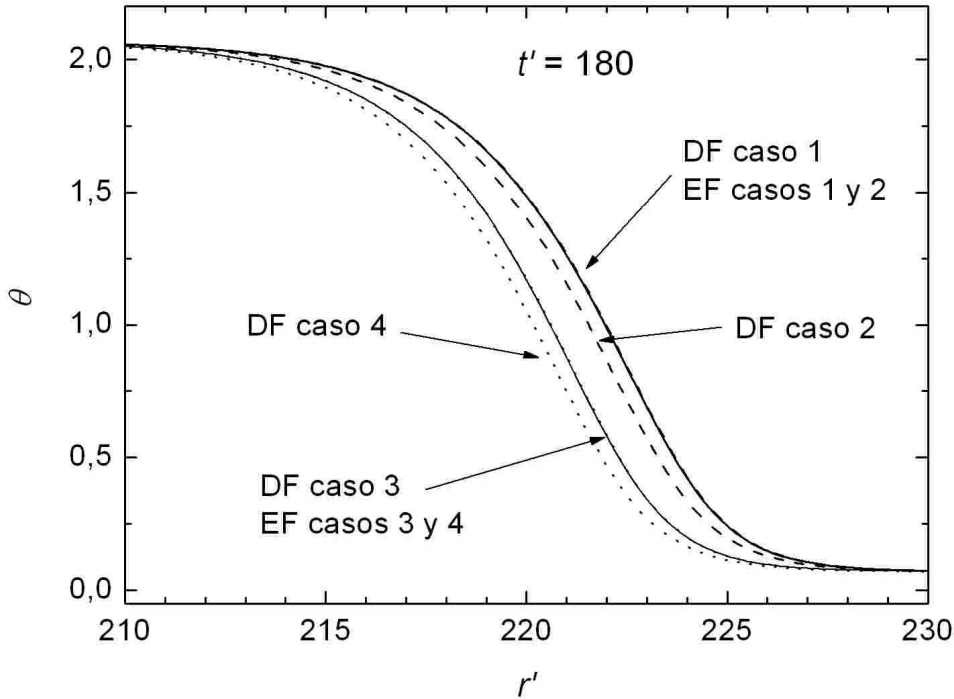


Figura.1. Frente de llama para un mismo tiempo adimensional (180) para los cuatro casos propuestos en la tabla 3 analizados mediante la aplicación del método de elementos finitos EF y el método de diferencias finitas DF ($C = 0,5$, $\varepsilon = 0$)

4.2 Propagación de pulsos

Si en la ecuación (4) tenemos en consideración el último término, las pérdidas por radiación reducen la temperatura una vez se haya consumido todo el combustible y la llama se aleje. De esta forma, se propaga un pulso y no un frente como en el caso anterior (véase, e.g., Fort et al. 2004).

Aquí también analizamos los resultados para la propagación de un pulso considerando la utilización de diferentes métodos numéricos. Los casos analizados son los mismos que los descritos en la tabla 3.

La figura 2 muestra los resultados para un tiempo adimensional igual a 180 (igual al del caso anterior, pero ahora la velocidad es menor por culpa de las pérdidas de energía por radiación). Los resultados siguen la pauta observada en la figura 1, donde el método de elementos finitos se muestra más robusto que el de diferencias finitas.

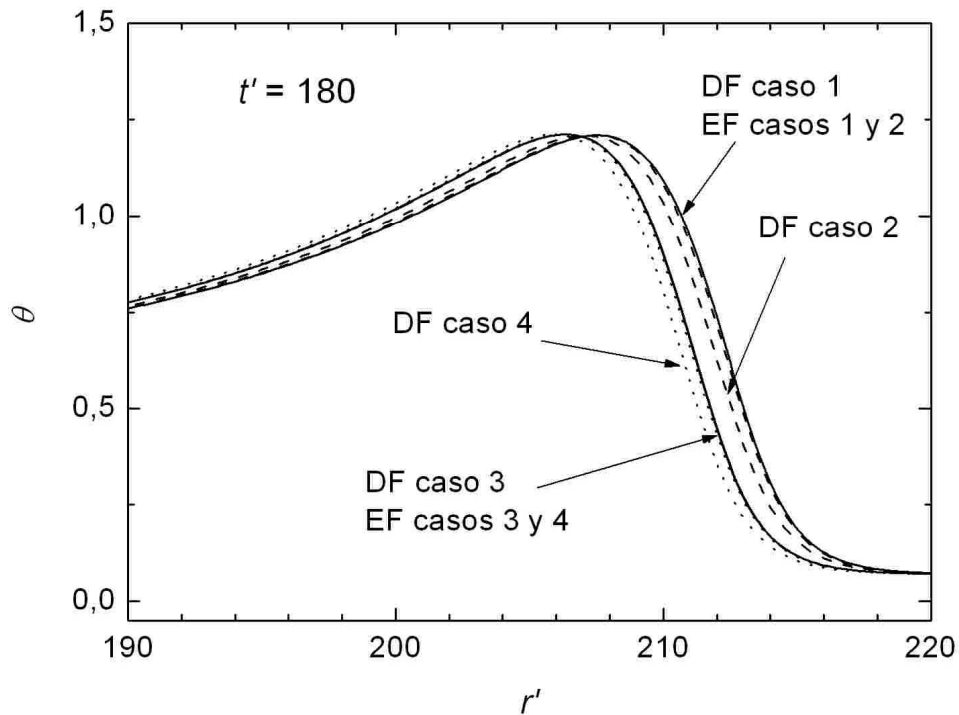


Figura.2. Pulso de llama para un mismo tiempo adimensional (180) para los cuatro casos propuestos en la tabla 3 analizados mediante la aplicación del método de elementos finitos EF y el método de diferencias finitas DF ($C = 0,5$, $\varepsilon = 0.04$)

5. CONCLUSIONES

Hemos analizado el comportamiento de diferentes métodos numéricos en la resolución de un modelo simple de combustión de llama premezclada formado por dos únicos componentes (combustible y no-combustible). Los métodos numéricos aquí empleados corresponden a las diferencias finitas y a los elementos finitos. En ambos casos se ha utilizado el mismo número de nodos para la malla que define los puntos de la discretización (en diferencias finitas) o los nodos del elemento (en elementos finitos). Además, hemos utilizado unas aproximaciones de las derivadas parciales, tanto para el tiempo como para la laplaciana espacial, idénticas para los dos métodos numéricos.

En el caso de los elementos finitos, la integración sobre el dominio de cada elemento se ha realizado de forma analítica para los términos en derivada parcial primera del tiempo y segunda en el espacio mediante la utilización de funciones de forma lineales de dos nodos. La integración de los términos de reacción y de pérdidas por radiación se ha

llevado a cabo mediante dos puntos de Gauss. No se han analizado métodos con funciones de forma no lineales.

Los resultados muestran como el método de elementos finitos es mucho más robusto que el método de diferencias finitas, si bien ambos métodos producen los mismos resultados para discretizaciones suficientemente finas. Sin embargo, el buen comportamiento del método de elementos finitos empleando elementos de mayor tamaño hace que su aplicación sea de gran interés, incluso para problemas de reducidas dimensiones. Otra ventaja del método de elementos finitos radica en la posibilidad de obtener valores de las variables dentro de un mismo elemento a partir de la aproximación (6), mientras que en las diferencias finitas se necesita efectuar una interpolación para aproximar valores entre dos puntos discretos. Además, el método de elementos finitos permite fácilmente la incorporación de mallas no regulares con lo que, según el problema analizado, la solución puede llegar a ser más precisa que con una malla uniforme.

Finalmente, el tiempo de cómputo para ambos métodos es muy similar en los casos mostrados en esta comunicación ya que, aquí, se integran analíticamente las funciones de forma en los términos de variación temporal y difusivo, lo que permite evitar el ensamblaje de la matriz de carga en el método de elementos finitos.

REFERENCIAS

Reddy, J. N., D. K. Gartling (2000). *The finite element method in heat transfer and fluid dynamics*, 2ª edición, 469 páginas. Boca Ratón, Florida.

Shih, T. M. (1984), *Numerical heat transfer*. 1ª edición, 563 páginas. Taylor & Francis, Londres.

Fort, J., D. Campos, J. R. González, J. Velayos (2004), Bounds for the propagation speed of combustion flames. *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 7185-7198.