

ANÁLISIS NUMÉRICO DE ONDAS DE DETONACIÓN RETARDADA

P.M. JACOVKIS *†
y
R.R. ROSALES **‡

** Instituto de Cálculo y Departamento de Computación,
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires,
Ciudad Unversitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina*

*** Department of Mathematics, Massachusetts Institute of Technology,
Cambridge, Massachusetts 02139 USA*

RESUMEN

La detonación con retardo debida a reacciones químicas en gases combustibles provocada por ondas de choque puede modelizarse en su forma más simple mediante una ecuación de Burgers forzada por una delta de Dirac movible que representa la posición de la zona de combustión. En este trabajo se resuelve numéricamente este modelo por medio de variantes del método de Godunov que tienen en cuenta la inclusión de la delta en el modelo.

SUMMARY

A "detonation with delay" due to chemical reactions in combustible gases originated by shock waves may be modelled, in its simplest form, through a Burgers equation forced by a moving Dirac delta representing the position of the heat released by the reaction. In this work this model is solved numerically by means of variants of the Godunov's method that take into account the inclusion of the delta in the model.

† El autor agradece el apoyo de la Organización de Estados Americanos, del Instituto Tecnológico de Massachusetts, del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas de Argentina (CONICET) a través de su subsidio Res. 1949/90, y de la Sloan Foundation.

‡ El autor agradece a la National Science Foundation (NSF) a través de sus subsidios NSF INT9016555 y NSF DMS-9008520, y a la Universidad de Buenos Aires.

Recibido: Noviembre 1992

INTRODUCCIÓN

En un medio gaseoso combustible un choque reactivo o detonación es una onda de choque (el choque "precursor") que avanza y va produciendo una reacción química que provoca la liberación de una cantidad importante de calor muy rápidamente, la cual a su vez "fuerza" la onda de choque, produciendo así una estructura autosostenida (la detonación) que no decae, a diferencia de las ondas de choque en medios inertes. En este trabajo se analizará el caso en que la reacción química no se produce instantáneamente (en el material sometido a la onda de choque), sino transcurrido un intervalo temporal que depende de la fuerza del choque.

Si se considera la situación unidimensional en la variable espacial, la simplificación más drástica de las ecuaciones de Euler de la dinámica de gases que preserva la característica de tener choques está dada por la ecuación en derivadas parciales hiperbólica casilineal escalar de Burgers no viscosa

$$u_t + (p(u))_x = 0, \quad (1)$$

donde $p = p(u) = u^2/2$ es la ecuación de estado. Esta situación es válida en el caso de ondas débilmente no lineales, donde las desviaciones desde un estado de referencia de todas las variables de estado del gas (temperatura, velocidad, etc.) son proporcionales al escalar u . Si agregamos a esto el comportamiento químico más sencillo posible, obtenemos un modelo del tipo

$$u_t + (p(u, \lambda))_x = 0, \quad \lambda_x = -r(u, \lambda), \quad (2)$$

donde ahora $r = r(u, \lambda)$ es la tasa de reacción y $p = p(u, \lambda) = u^2/2 + q\lambda$ es la ecuación de estado. El parámetro λ es el grado de reacción y suponemos $0 \leq \lambda \leq 1$, con $r \geq 0$ y donde $\lambda = 0$ para el combustible y $\lambda = 1$ para los productos de reacción (está implícito que solamente se consideran ondas que se desplazan hacia la derecha). Aquí la constante q es el suministro de calor. Este tipo de modelo generaliza (1) para apropiadas suposiciones sobre la reacción química. Para una derivación asintótica se puede ver Rosales y Majda¹¹.

Si la reacción es instantánea, y se produce en la posición $x_f = x_f(t)$, tendremos que

$$\begin{aligned} \lambda &= 1 && \text{si } x < x_f, \\ \lambda &= 0 && \text{si } x > x_f, \end{aligned} \quad (3)$$

o sea $r = \delta(x - x_f)$, siendo δ la delta de Dirac. Es decir, la ecuación representativa del modelo es ahora

$$u_t + (u^2/2)_x = q\delta(x - x_f), \quad (4)$$

donde todavía falta una ecuación que determine x_f , que llamaremos la posición de la "llama".

La idea de detonación retardada equivale a la de "imagen latente", que surgió de estudios recientes con explosivos sólidos: la distancia del choque precursor a la cual

una partícula de combustible reacciona depende de cuán fuerte es el choque, y ésta es la única dependencia (es como si cada molécula del medio reactante tuviera un cronómetro interno, que es inicializado en el momento en que la partícula pasa por el choque; esto se comprende en términos de moléculas bastante complejas e inestables que tienen que pasar por una serie de estados y reacciones intermedias, más o menos "lerdas", hasta que el proceso que libera la parte principal de la energía química ocurre "rápidamente"). Por consiguiente, se tendrá

$$x_f = x_f(t) = x_s - d(t), \quad (5)$$

donde x_s es la posición del choque precursor y la distancia $d > 0$ entre el choque precursor y la llama está dada por $d = F(u_s^-)$, siendo u_s^- el valor de u del lado de atrás del choque precursor y F una función dada que caracteriza la dependencia de la distancia (entre el choque precursor y la llama) de la fuerza del choque.

El tipo de problema aquí planteado ha interesado a investigadores desde fines del siglo pasado. Chapman¹ y Jouguet⁵ propusieron, en forma independiente, la primera teoría para ondas de detonación en 1899 y 1905, respectivamente, motivados por las explosiones en minas de carbón. La teoría de Chapman y Jouguet (CJ) es muy simple y está basada en asumir la liberación instantánea de la energía química simultáneamente con el choque precursor; un enfoque más complejo está dado por la teoría de Zeldovich-von Neumann-Doering (ZND, ver [16], [9] y [2]), desarrollada a principios de los años cuarenta. La teoría ZND también ignora la viscosidad y modela los choques como discontinuidades, pero toma en cuenta la escala mayor de tiempo en los procesos químicos (relativos al tiempo del paso del choque precursor por una partícula). Las reacciones químicas son entonces modeladas explícitamente en una "zona de combustión" inmediatamente detrás del choque precursor. Las ondas de detonación poseen entonces "estructura interna", un hecho importante para el estudio y comprensión de las inestabilidades que poseen y que afectan su propagación. Lamentablemente, el análisis (teórico) de la estabilidad de las ondas de detonación dentro del marco de la teoría ZND es bastante complicado. Para simplificar el problema, sin perder la estructura interna de las ondas (como ocurre en la teoría CJ), en 1959 Schelkin¹² propuso el modelo de detonación de "onda cuadrada", donde la reacción química ocurre instantáneamente, pero no coincide con el choque precursor, sino que ocurre con un tiempo de retardo detrás de éste. Un análisis de estabilidad (lineal) realizado por Zaidel¹⁵ en 1961 en el contexto de este último modelo condujo al sorprendente e intrigante fenómeno de "inestabilidad catastrófica": la onda cuadrada es inestable ante perturbaciones de alta frecuencia, con tasas de crecimiento arbitrariamente grandes. Esto es paradójico, pues indicaría que este modelo está matemáticamente "mal planteado" lo cual contradice otros estudios (cualitativos y semicuantitativos) del modelo. Para una descripción más completa de este problema y otros similares ver, por ejemplo, Fickett³ y Rosales¹⁰. El objetivo de la investigación de la cual este artículo forma parte es el entendimiento y resolución de la "paradoja" del fenómeno de la inestabilidad catastrófica descrita en el párrafo anterior. Para ello en este artículo estudiamos, numérica y analíticamente, el modelo muy simplificado de onda cuadrada descripto al principio de esta sección. Puede demostrarse que en este

modelo la "inestabilidad catastrófica" también ocurre, pero un estudio detallado de las soluciones demuestra que la paradoja se debe a que el análisis de estabilidad lineal es incorrecto y no vale cerca de la posición de la delta. En este artículo presentaremos algunas soluciones exactas de las ecuaciones del modelo, y un método numérico para la solución de las ecuaciones del mismo.

Modelos similares al nuestro fueron propuestos, sobre la base de un análisis cualitativo, por Majda⁸ y Fickett³. La principal diferencia es que tanto Fickett como Majda consideran la relación entre el grado de reacción y la tasa de reacción como $\lambda_t = r$, o sea derivan respecto del tiempo. El tipo de modelo que seguiremos en este trabajo fue propuesto por Rosales y Majda¹¹ sobre la base de una derivación asintótica, y permite estudiar teórica y numéricamente el problema de la estabilidad de este modelo de manera más clara y representativa. Este problema es clave en la comprensión del fenómeno, pues el modelo incluye ecuaciones hiperbólicas no lineales forzadas por funciones delta. Tales sistemas son muy sensibles a las componentes de alta frecuencia en la posición de la delta, pues su comportamiento cerca de la posición del término que fuerza la reacción es extremadamente no lineal y explica la razón de la "inestabilidad catastrófica" que aparece en análisis puramente lineales de estabilidad.

El objeto de este trabajo es resolver la ecuación (4), (5) numéricamente, de modo de obtener una visión más precisa de los complejos fenómenos no lineales que se producen. Trabajaremos con dos casos simplificados: el caso simple en que la posición x_f de la llama está dada exógenamente, o sea

$$x_f = x_f(t), \quad (6)$$

con $x_f(t)$ dada a priori, y aquél en que la posición del choque precursor es fija (choque "clavado"), y se tiene una función del tipo $x_f = \alpha \cdot |u - u_c|^n + d$, con α , u_c , n y d constantes dadas, y u evaluado en algún punto fijo x_s , $u = u(x_s, t)$, con $x_s > x_f$. O sea, relativo al modelo "completo", prefijamos la posición del choque precursor en vez de permitir su evolución "natural" de acuerdo a las ecuaciones del modelo (condiciones de Rankine-Hugoniot y "entropía" en el choque).

Se puede observar que la condición de Rankine-Hugoniot sobre la llama x_f es, cuando dx_f/dt existe (suponemos que el camino de la llama es suave a trozos)

$$-(dx_f/dt)[u] + [u^2/2] = 1, \quad (7)$$

donde el corchete $[u]$ indica el salto de u a través de x_f , y donde, sin pérdida de generalidad, tomamos $q = 1$. Además, es necesaria una condición de entropía para la existencia de solución única del problema de valores iniciales. En términos de la interpretación de la delta como una fuente de energía, esta condición es fácil de motivar y puede formularse como:

i) Las características de la ecuación hiperbólica que representa al modelo (las curvas dadas por $dx/dt = u$) no terminan en la llama. O sea, la llama no es un choque, y la información que llevan las características sobre el estado inicial fluye a través de ella.

ii) El valor de u a lo largo de una característica cualquiera aumenta cuando la característica cruza el camino de la llama.

En término de los valores $u_- = u_-(t)$ y $u_+ = u_+(t)$ (límites por izquierda y derecha de u) para x que tiende a x_f estas condiciones pueden formularse como

$$u_+ > u_- \geq dx_f/dt \quad \text{o} \quad dx_f/dt \geq u_- > u_+. \quad (8)$$

El resto del artículo está organizado como sigue: sucesivamente mostramos algunas soluciones exactas del modelo, describimos el método de Godunov para (1), presentamos un esquema numérico que modifica el de Godunov incorporando la delta directamente en la solución del problema de Riemann, proponemos un esquema a paso fraccionario, estudiamos densificaciones en la malla, exhibimos diagnósticos que permiten controlar el comportamiento de los métodos, detallamos algunos experimentos numéricos, y finalmente terminamos el artículo con algunas observaciones sobre el proyecto global del cual este artículo forma parte.

ALGUNAS SOLUCIONES EXACTAS

La onda cuadrada

Es fácil ver que la solución estacionaria del modelo (4), (5), "onda cuadrada", está dada por

$$x_f = x_o - d + Vt, \quad x_s = x_f + d, \quad (9)$$

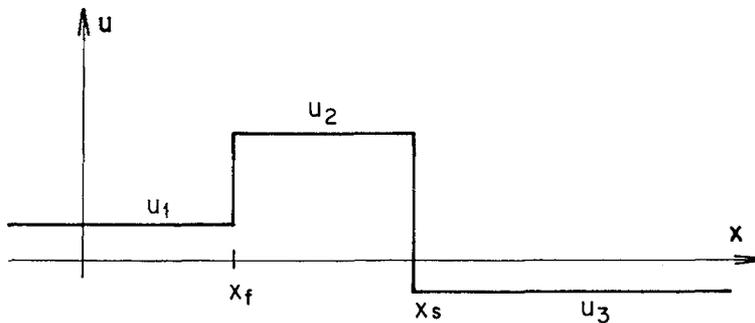


Figura 1. Solución estacionaria (onda cuadrada).

con u tomando los valores u_1 , u_2 y u_3 para $x < x_f$, $x_f < x < x_s$ y $x_s < x$, respectivamente, donde u_1 , u_2 , u_3 , x_o , V y $d = F(u_2) > 0$ son constantes restringidas por las condiciones de choque en el choque precursor $x = x_s(t)$ y las condiciones (7), (8) en la llama $x = x_f(t)$ (ver Figura 1). Estas condiciones son:

$$u_2 > u_1 \geq V > u_3, \quad V = (u_2 + u_3)/2 \quad \text{y} \quad (u_2 - V)^2 - (u_1 - V)^2 = 2, \quad (10)$$

donde $q = 1$. En estas ecuaciones se pueden elegir V y u_3 arbitrariamente, con $V \geq u_3 + \sqrt{2}$, y entonces

$$u_2 = 2V - u_3, \quad u_1 = V + \sqrt{(V - u_3)^2 - 2}. \quad (11)$$

También se pueden parametrizar las soluciones por $u_1 \geq V$ arbitrarios, con $u_2 = V + \sqrt{2 + (u_1 - V)^2}$ y $u_3 = 2V - u_2 = V - \sqrt{2 + (u_1 - V)^2}$.

(El caso $V = u_1$, $u_2 = V + \sqrt{2}$, $u_3 = V - \sqrt{2}$ corresponde a la llamada "onda de Chapman-Jouguet").

Cabe mencionar que es en el análisis lineal de estabilidad de esta solución de onda cuadrada donde aparece el fenómeno de las inestabilidades catastróficas.

Problemas de valores iniciales

Se puede demostrar que la solución u^* del problema de valores iniciales para (4), (6) con $q = 1$, x_f constante y $u = u_o$ constante en $t = 0$ está dada por

$$\begin{aligned} u^* &= \sqrt{u_o^2 + 2} && \text{si } 0 < x - x_f < (u_o + \sqrt{2 + u_o^2})t/2, \\ &= u_o && \text{en caso contrario,} \end{aligned} \quad (12a)$$

cuando $u_o \geq 0$;

$$\begin{aligned} u^* &= -\sqrt{u_o^2 - 2} && \text{si } -(\sqrt{u_o^2 - 2})t \leq x - x_f < 0, \\ &= (x - x_f)/t && \text{si } u_o t \leq x - x_f \leq -(\sqrt{u_o^2 - 2})t, \\ &= u_o && \text{si } x - x_f > 0 \text{ o } x - x_f \leq u_o t, \end{aligned} \quad (12b)$$

cuando $u_o \leq -\sqrt{2}$;

$$\begin{aligned} u^* &= \sqrt{2} && \text{si } 0 < x - x_f < (u_o + (\sqrt{2})t)/2, \\ &= (x - x_f)/t && \text{si } u_o t \leq x - x_f < 0, \\ &= u_o && \text{si } x - x_f \leq u_o t \text{ o } x - x_f > (u_o + \sqrt{2})t/2, \end{aligned} \quad (12c)$$

cuando $-\sqrt{2} \leq u_o \leq 0$. Las Figuras 2, 3 y 4 ilustran los casos 12a, 12b y 12c, respectivamente.

Esta solución resulta útil en la preparación de uno de los métodos numéricos empleados. Se obtiene fácilmente usando el método de las características (u es constante a lo largo de las características, excepto cuando la característica cruza x_f), introduciendo choques donde las características se cruzan y usando (7) y (8) para determinar las características cuando éstas cruzan la llama en $x = x_f$. En todos los casos listados arriba podemos notar la aparición de regiones donde la perturbación al valor inicial u_o es de orden uno para tiempos arbitrariamente pequeños. Este comportamiento extraño (altamente no lineal) es la causa última de las inestabilidades catastróficas.

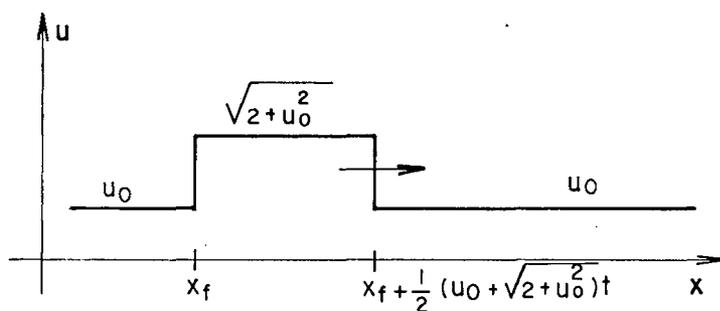


Figura 2. Problema de valores iniciales (caso a).

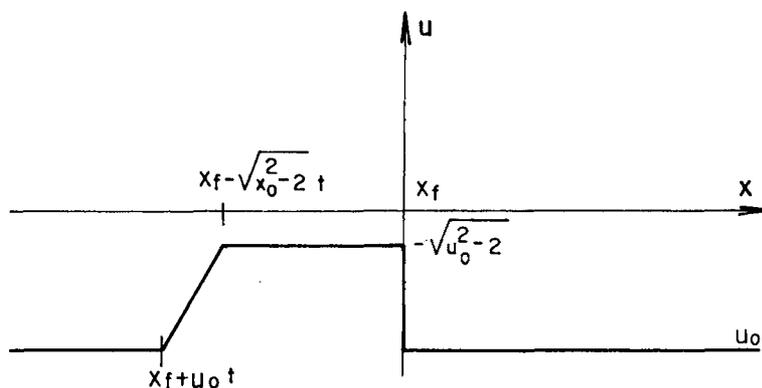


Figura 3. Problema de valores iniciales (caso b).

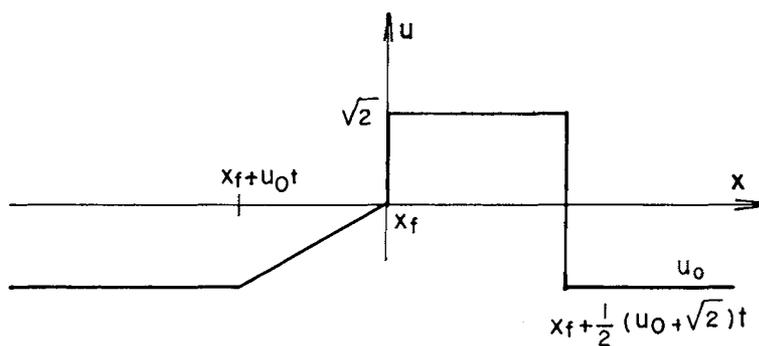


Figura 4. Problema de valores iniciales (caso c).

EL MÉTODO DE GODUNOV

Como es conocido, las soluciones de leyes de conservación hiperbólicas y genuinamente no lineales

$$\partial u / \partial t + \partial(f(u)) / x = 0 \quad (13)$$

pueden tener discontinuidades por más regular que sea la condición inicial. En particular, en el caso escalar, esto sucede si $f''(u) \neq 0$. La solución, para ser única, deberá considerarse como solución débil que cumple una condición denominada de entropía, y las discontinuidades en ese caso se propagan a través de curvas denominadas ondas de choque (ver Lax⁶). La teoría correspondiente puede verse, por ejemplo, en Smoller¹³. Para resolver esta ecuación es necesario apelar a métodos numéricos, pues salvo casos especiales no existe solución explícita. Entre los métodos numéricos usualmente empleados, interesan en particular aquéllos que reflejan con exactitud la conservación de la masa (o de lo que la variable u signifique) por un lado, y que detecten con la mayor precisión posible la ubicación de las ondas de choque en cada instante de discretización, sin crear oscilaciones espúreas, por el otro. Entre estos métodos, el método de Godunov, originariamente publicado en [4], es de los más difundidos, a pesar de ser solamente de primer orden de aproximación. Una descripción del método de Godunov y sus generalizaciones puede verse en LeVeque⁷.

El método de Godunov es un método en diferencias finitas explícito que trabaja sobre aproximaciones u_i^n a la función incógnita u en el instante $n\Delta t$ en el intervalo espacial $I = ((i-1)\Delta x, i\Delta x)$. El valor u_i^n se interpreta como el promedio $(\int_I u dx) / \Delta x$ en el instante $n\Delta t$. Dados los valores u_i^n en el instante conocido $n\Delta t$, los valores en el instante siguiente $(n+1)\Delta t$ se obtienen mediante un procedimiento en dos etapas: en la primera etapa se obtienen valores provisorios \tilde{u}_i^n en los puntos espaciales $i\Delta x$ como soluciones en el instante Δt del problema de Riemann con condición inicial $u = u_i^n$ para $x < i\Delta x$, $u = u_{i+1}^n$ para $x > i\Delta x$, y en la segunda etapa se obtienen los valores definitivos u_i^{n+1} como soluciones de la ecuación en diferencias

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t (f(\tilde{u}_{i-1}^n) - f(\tilde{u}_i^n)) / \Delta x. \quad (14)$$

Esto corresponde a resolver en forma exacta el problema de valores iniciales donde $u = u_i^n$ en cada intervalo I y luego obtener u_i^{n+1} tomando los promedios de esta solución.

Hemos considerado intervalos de discretización espaciales y temporales uniformes y comenzados a contar desde los respectivos orígenes, pero por supuesto estas suposiciones son exclusivamente para simplificar la descripción. Como puede verse en la referencia citada de Smoller, el problema de Riemann (o sea, el problema hiperbólico no lineal en forma de ley de conservación con condición inicial $u_o(x) = u_l$, $x < x_o$, $u_o(x) = u_r$, $x > x_o$ se puede resolver explícitamente en forma exacta. El resultado es, en el caso de $f = u^2/2$ (que es el que nos interesa)

$$\begin{aligned} u_i^n & \text{ si } u_i^n \geq -u_{i+1}^n \text{ y } u_i^n \geq 0, \\ u_{i+1}^n & \text{ si } u_i^n \leq -u_{i+1}^n \text{ y } u_{i+1}^n \leq 0, \\ 0 & \text{ si } u_i^n \leq 0 \leq u_{i+1}^n. \end{aligned} \quad (15)$$

Dado que es un método explícito, el método de Godunov requiere como condición de estabilidad que se cumpla la condición de Courant-Friedrich-Lewy, $\Delta t/\Delta x \leq 1/\max|u(t, x)|$. Esta es, precisamente, la condición para que las discontinuidades en los nodos x_i de la malla no lleguen a afectar la solución en ningún otro punto de discretización en el tiempo Δt .

En el problema que analizamos, la ley de conservación, en vez de ser homogénea, está igualada a una delta de Dirac móvil; por tal motivo, en este trabajo se han utilizado modificaciones del método de Godunov que incluyen un tratamiento de la delta, que es lo que describiremos a continuación.

EL ESQUEMA TOTALMENTE CONSERVATIVO

El esquema totalmente conservativo que se propone a continuación mantiene las propiedades del esquema original de Godunov, usando la solución (12) de este artículo. La idea es, como en el método de Godunov sin la delta, resolver en forma exacta el problema de valores iniciales $u = u_i^n$ en cada intervalo I , con x_f constante, y luego obtener u_i^{n+1} promediando esta solución exacta. En los intervalos no influidos por la delta (que se considera inmóvil en cada intervalo Δt) el cálculo es como indica el método de Godunov; en el intervalo al cual pertenece x_f , el siguiente, y el anterior, es necesario tomar en cuenta que la función de flujo $f(x)$ se modifica debido al aporte de la llama (si la señal producida por ésta llega al borde del intervalo): para precisar, digamos $x_{i-1} \leq x_f < x_i$, con x_f constante, para algún i , durante el intervalo de cálculo Δt . Como el valor que tomamos en la ecuación (14) para el flujo debe ser el promedio temporal $(\int f(t, x)dt)/\Delta t$ en el intervalo de cálculo Δt , es necesario tener en cuenta todas las posibilidades de modificación, considerando que la perturbación producida por la llama en x_f se propaga de acuerdo al ejemplo en (12). Por ejemplo, si $u_i \geq 0$ y $u_i \geq -u_{i+1}$ (para simplificar, no usamos aquí el superíndice n) el choque producido por la llama se desplaza a velocidad $(u_i + \tilde{u})/2$, donde $\tilde{u} = \sqrt{2 + u_i^2}$. Si la onda no llega al punto extremo x_i en el intervalo Δt , nada cambia. De lo contrario, se tendrá

$$f_i = (f(u_i)\Delta t_1 + f(\tilde{u})(1 - \Delta t_1))/\Delta t, \quad (16)$$

en que Δt_1 es el tiempo que tarda la onda de choque producida por la llama en llegar a x_i .

En forma análoga se tratan todas las otras combinaciones de velocidades u_i y u_{i+1} posibles. Cabe señalar que para el cálculo de la condición de Courant es necesario tener en cuenta también el valor \tilde{u} entre los valores para los que se determina el máximo; de otra forma la delta podría afectar otros flujos aparte de f_i y f_{i-1} . También es de notar que la delta puede afectar f_{i-1} sólo si $u_i < 0$.

En este esquema, la trayectoria de la delta, $x = x_f(t)$, se aproxima por una función constante a trozos, con x_f constante en cada intervalo Δt . Esta aproximación es consistente con un esquema de primer orden, pero produce oscilaciones parásitas bastante molestas. Esto conduce a la necesidad de usar aproximaciones de orden superior a la trayectoria de la delta, como veremos en la próxima sección.

EL ESQUEMA DE PASOS FRACCIONARIOS

Este esquema es más simple que el anterior, e interesa ver si no se pierde precisión. El esquema es el siguiente: directamente se consideran dos pasos: en el primer paso, se resuelve la ecuación de Burgers homogénea (1) con $p(u) = u^2/2$ por el método de Godunov; en el segundo paso, se resuelve la ecuación

$$\partial u / \partial t = \delta(x - x_f) \quad (17)$$

considerando que, si el intervalo de discretización al cual pertenece x_f es el correspondiente al subíndice i , entonces valdrá

$$u_i^{n+1} = \tilde{u}_i^{(n+1)} + \Delta t / \Delta x, \quad (18)$$

donde $\tilde{u}_i^{(n+1)}$ es el valor de u obtenido con el método de Godunov. Para los demás intervalos el valor obtenido de u no se modifica.

El esquema anterior considera que la llama no se mueve del intervalo i durante todo el tiempo Δt . Para llamas que se trasladan con mucha velocidad, se obtiene mayor precisión (y se reducen sensiblemente las oscilaciones parásitas) si se distribuye la masa generada por la llama en forma proporcional a los intervalos que atraviesa la llama. Es decir, si $x_f(t) \in I_i$ y $x_f(t + \Delta t) \in I_j$, y suponiendo $i < j$ por simplicidad (el caso inverso es análogo) se tendrá

$$u_k^{n+1} = \tilde{u}_k^{(n+1)} + \omega_k \Delta t / \Delta x, \quad (19)$$

donde $\omega_k = 0$ si $k < i$ o $k > j$

$$\begin{aligned} \omega_k &= 1/(j-i) \quad \text{si } i < k < j, \\ \omega_k &= (x_i - x_f)/((j-i)\Delta x) \quad \text{si } k = i, \\ \omega_k &= (x_f - x_{j-1})/((j-i)\Delta x) \quad \text{si } k = j. \end{aligned} \quad (20)$$

Aquí ω_k es la fracción de tiempo que la llama permanece en cada intervalo Δx durante el intervalo temporal Δt , y se calcula suponiendo una velocidad constante de desplazamiento. En este esquema el camino de la llama es entonces aproximada por una función lineal a trozos.

DENSIFICACIÓN DE LA MALLA

Se ha considerado útil admitir la posibilidad de que la malla de cálculo se densifique cerca de la llama, con el objeto de tener allí mayor precisión. Eso obliga a una disminución del tamaño de los intervalos temporales, para que no se viole la condición de Courant. El criterio usado para la densificación es el siguiente: sean x_{k_1} y x_{k_2} los límites del intervalo de malla más densa. Se calcula f_{k_1-1} en la forma usual dada por $f(\tilde{u})$, con \tilde{u} solución del problema de Riemann en x_{k_1} . Esa f_{k_1} será condición de contorno en todos los intervalos temporales de tamaño menor. En el extremo derecho, se obtiene f_{k_2+1} en la misma forma. Después se avanza entre x_{k_1-1} y x_{k_1+1} en la forma

usual, con los pasos temporales menores (ver la Figura 5) de acuerdo a la condición CFL para la malla más densa.

La malla densa puede correrse, si la llama se acerca mucho a alguno de los bordes. Los nuevos valores de u serán los promedios sobre intervalos mayores de los valores en los intervalos menores, cuando al correrse la malla se "ralifican" los intervalos; en cambio, en los intervalos que se "densifican", los valores nuevos se obtienen por interpolación lineal o por seguimiento de choques, en la forma indicada en Tabak¹⁴.

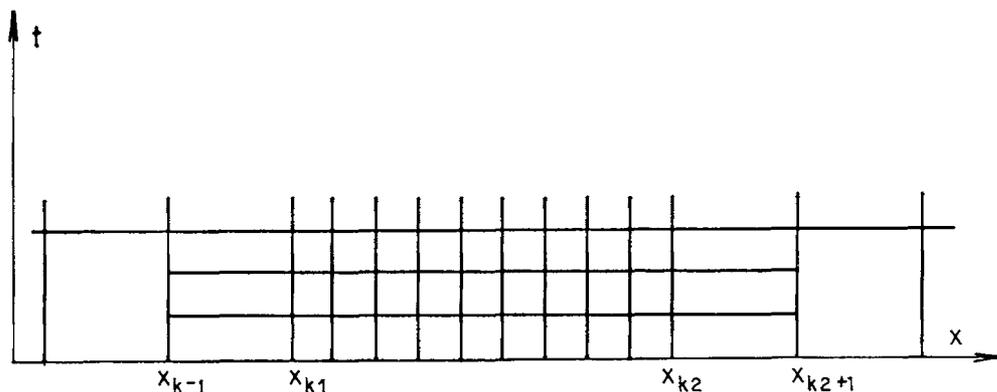


Figura 5. Densificación de la malla.

CRITERIOS DE VALIDACIÓN

Para la ecuación homogénea (1) se puede verificar muy rápidamente si el esquema numérico utilizado, cualquiera sea éste, es conservativo o no, y en muchos casos esa propiedad es importante. En este análisis hemos aplicado un criterio de conservación similar, adaptado a la ecuación (4). Si definimos

$$M(t) = \int_a^b u(t, x) dx, \quad (21)$$

de la ecuación (4) con $q = 1$ se deduce, integrando respecto de x y suponiendo $a < x_f < b$, que

$$\partial M / \partial t + u^2(b, t) / 2 - u^2(a, t) / 2 = 1. \quad (22)$$

Integrando respecto de t , obtenemos

$$M(t) + \left(\int_0^t (u^2(b, s) - u^2(a, s)) dt \right) / 2 - t = M(0) \quad (23)$$

y el término de la izquierda debe conservarse numéricamente. En particular, si la condición de contorno a la izquierda es $u(a, t) = \nu \geq 0$, y la condición inicial es

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \nu && \text{cuando } x < x_o, \\ &= \mu && \text{cuando } x > x_o, \end{aligned} \quad (24)$$

siendo $\sqrt{\nu^2 + 2} = \mu$, se obtiene, reemplazando en (23), que

$$M(t) + \left(\int_0^t u^2(b, s) ds\right)/2 - \mu^2 t/2 = M(0) \quad (25)$$

y $M(t)$ no varía hasta que la primera señal llega al extremo b .

El segundo esquema de validación toma en cuenta una especie de disipación de energía, considerando como tal a

$$E(t) = \left(\int_a^b u^2 dx\right)/2. \quad (26)$$

Si la trayectoria $x(t)$ de la llama es regular, se tiene

$$\begin{aligned} dE/dt &= (dx_f/dt)(u_-^2/2) + \int_a^{x_f} (u_-^2/2)_t dx + \int_{x_f}^b (u^2/2)_t dx - \\ &\quad (dx_f/dt)(u_+^2)/2 \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} &\leq - (dx_f/dt)(u_+^2 - u_-^2)/2 - \int_a^{x_f} (u^3/3)_x dx - \int_{x_f}^b (u^3/3)_x dx \\ &= - (dx_f/dt)(u_+ - u_-)(u_+ + u_-)/2 - u_-^3/3 + u_+^3/3 + u(a)^3/3 - u(b)^3/3. \end{aligned}$$

A su vez, la condición de Rankine-Hugoniot para la ecuación de Burgers igualada a una delta de Dirac es

$$-(dx_f/dt)(u_+ - u_-) + (u_+^2 - u_-^2)/2 = 1, \quad (28)$$

de donde se deduce que la última expresión en (27) es igual a

$$(u_+ + u_-)/2 - (u_+ + u_-)(u_+^2 - u_-^2)/4 + (u_+^3 - u_-^3)/3 - (u^3(b) - u^3(a))/3 \quad (29)$$

Si llamamos $\mathcal{L}(t)$ a (29), tenemos que $E(t) - \int_0^t \mathcal{L}(s) ds$ es decreciente en t , y constante en caso de no haber choques, pues en este caso la desigualdad en (27) es en realidad una igualdad. Este es nuestro segundo criterio de validación.

En ambos casos, en los cálculos numéricos realizamos las correspondientes integraciones numéricas por el método del trapecio, que es suficientemente preciso para nuestros propósitos.

EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Los experimentos numéricos realizados fueron los siguientes:

A	B	C	D	E	F	G
1	[-2 2]	$x_f = \text{sen}(2\Pi t)$	0,001	2	0	20
2	[-2 2]	Periódica de período 1 $x_f = 0,5t$ $0 \leq t < 1$	0,001	2	0	5
3	[-2 2]	Periódica de período 1 $x_f = 1 - 0,5t$ $0 \leq t < 1$	0,001	2	0	5
4	[-3 3]	$x_f = \text{sen}(2\Pi t)$	0,01* 0,001**	1	0	5
5	[-3 3]	$x_f = -2,80 + t$	0,001	2	-2,80	5
6	[-3,5 3,5]	$x_f = -2,80 + t$	0,01* 0,001**	1	-2,80	5
7	[-3 3]	$x_f = 1 - 0,1(u(3,t) - 2)$	0,001	2	-1	10
7b		$x_f = -1 - 0,5(u(3,t) - 2)$	0,001	2	0	10
8	[-3 3]	$x_f = -1 - 0,1(u(3,t) - 2)$	0,01* 0,001**	1	-1	10
	[-3 3]	$x_f = -1 - 0,5(u(3,t) - 2)$	0,01* 0,001**	1	-1	10
	[-3 3]	$x_f = -1 - 0,5(u(3,t) - 2)$	0,01* 0,001**	1	-1	10
9	[-3 3]	$x_f = -2,50 + t$	0,001	2		5
10	[-3 3]	$x_f = -2,50 + 0,5(u(3,t) - 2)$	0,001	2	-2,5	10
10b					-2,4	
11	[-1,5 3]	$x_f = -1 - 0,5(u(3,t) - 2)$	0,0005	2	0	10
12	[-0,2 1]	$x_f = 0,15(u(1,t) - 2)$	0,002* 0,0002	2	-0,008	15,5
				2	-0,008	15,5
13	[-0,2 1]	$x_f = 0,15(u(1,t) - 2)$	0,0005	2	0,008	16
14	[-0,2 1]	$x_f = 0,15(u(1,t) - 2)$	0,0002	2	0,008	20
15	[-1 1]	$x_f = \alpha t$ $\alpha = 2, 4, 6, 8, 16,$ $-2, -4, -6, -8, -16$	0,004	2	0	***
16	[-1 1]	Idem 15	0,004	3	0	***

A: Experimento.

B: Intervalo espacial de integración numérica.

C: Forma de la llama (ecuación para x_f).

D: Intervalo de discretización Δx .

E: Tipo de experimento (esquema numérico usado).

F: Punto x_0 tal que para $x < x_0$ vale $u_0 = \sqrt{2}$ y para $x > x_0$ vale $u_0 = 2$, donde u_2 es la condición inicial.

G: Tiempo final de la simulación (el tiempo inicial es siempre 0).

* Malla gruesa.

** Malla densificada en un entorno de la llama.

*** Los tiempos finales fueron 0,45, 0,24, 0,15, 0,12 y 0,06 para $\alpha = 2$ o -2 , 4 o -4 , 6 o -6 , 8 o -8 y 16 o -16 , respectivamente.

- 1: Esquema totalmente conservativo.
- 2: Esquema de paso fraccionario (fórmula 18).
- 3: Esquema de paso fraccionario con distribución de masa generada por la llama en los intervalos que recorre en Δt (fórmulas 19 y 20).

Todos los intervalos temporales Δt están dados por $\Delta t = \Delta x/4$.

En la Figura 6 se muestra la forma de la función u en el instante $t = 6$ para el experimento 1, en el que se usa la fórmula (18) con $x_f(t) = \sin(2\Pi t)$. Puede verse cómo la señal sinusoidal en x_f se transforma en una onda diente de sierra en términos de u , debido a la no linealidad. Esto se puede justificar teóricamente.

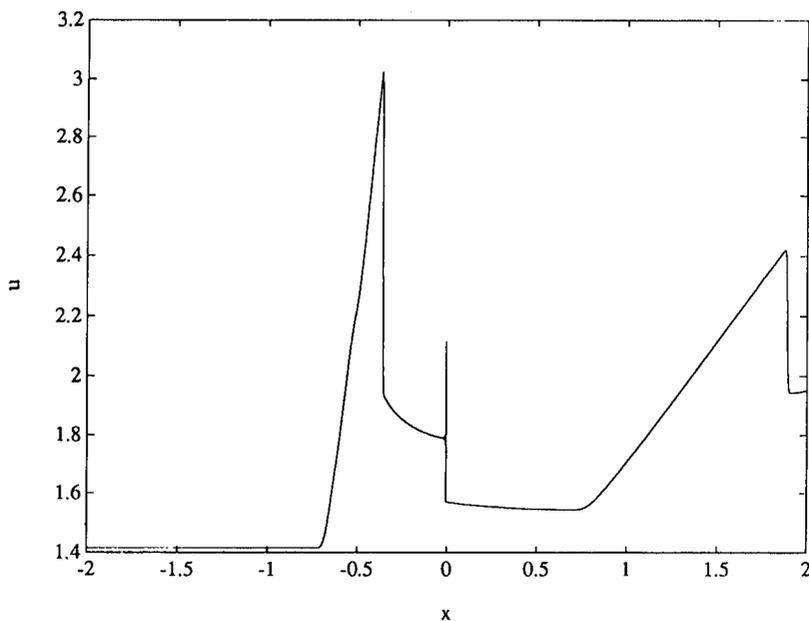
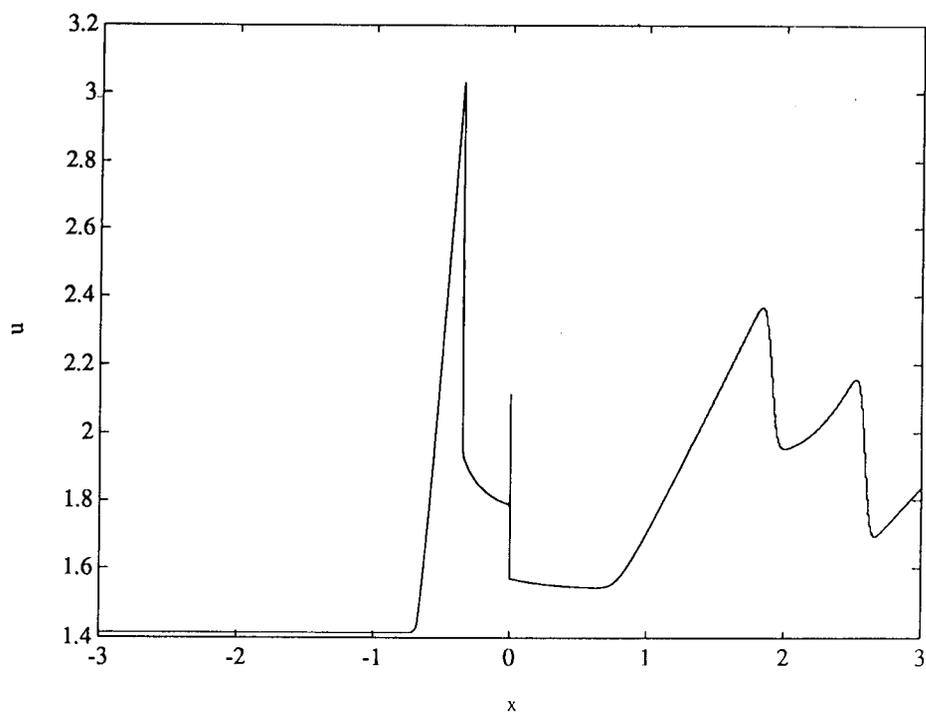
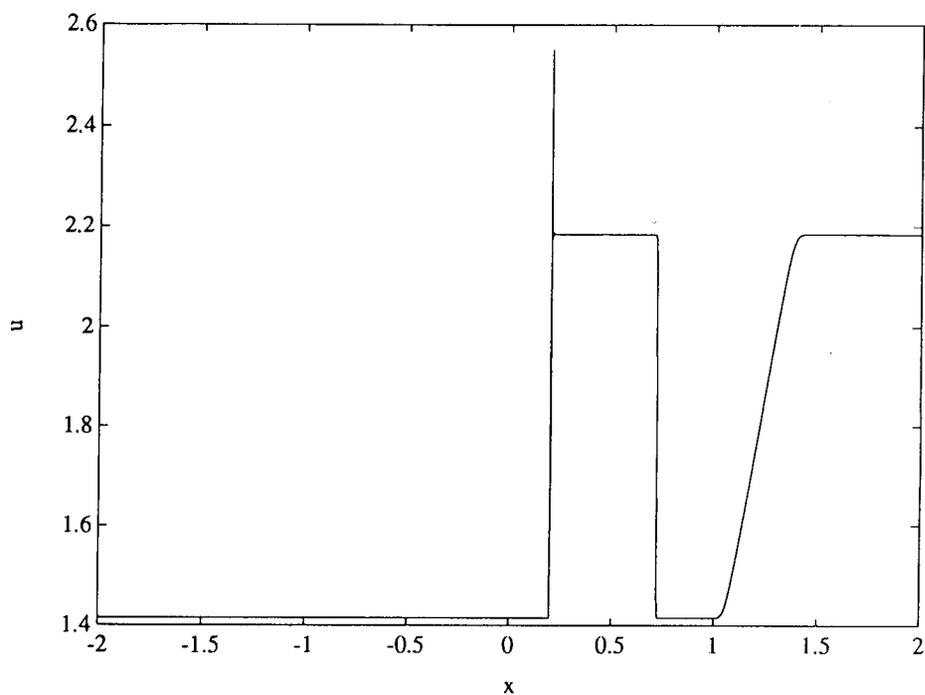


Figura 6. Experimento 1 en el tiempo $t = 6$.

En la Figura 7 se muestra la forma de u en el tiempo $t = 4$ para el experimento 4. Se usan los mismos parámetros del experimento 1, excepto que fuera del intervalo $-1 \leq x \leq 1$ se toma $\Delta x = 0,01$ (malla "gruesa"). Salvo el hecho que los choques son más difundidos por la mayor viscosidad numérica en la malla gruesa, los resultados son los mismos que en el experimento 1. El esquema numérico usado en este experimento es el totalmente conservativo.

En la Figura 8 se muestra la forma de u en el instante $t = 4,4$ para el experimento 2. Este experimento difiere del 1 en que x_f está dado ahora por una onda diente de sierra en que las discontinuidades en x_f representan un salto hacia atrás de la delta. Finalmente esto también produce en u una onda diente de sierra, con los dientes "hacia abajo" (comparar con la Figura 9).

Figura 7. Experimento 4 en el tiempo $t = 4$.Figura 8. Experimento 2 en el tiempo $t = 4$.

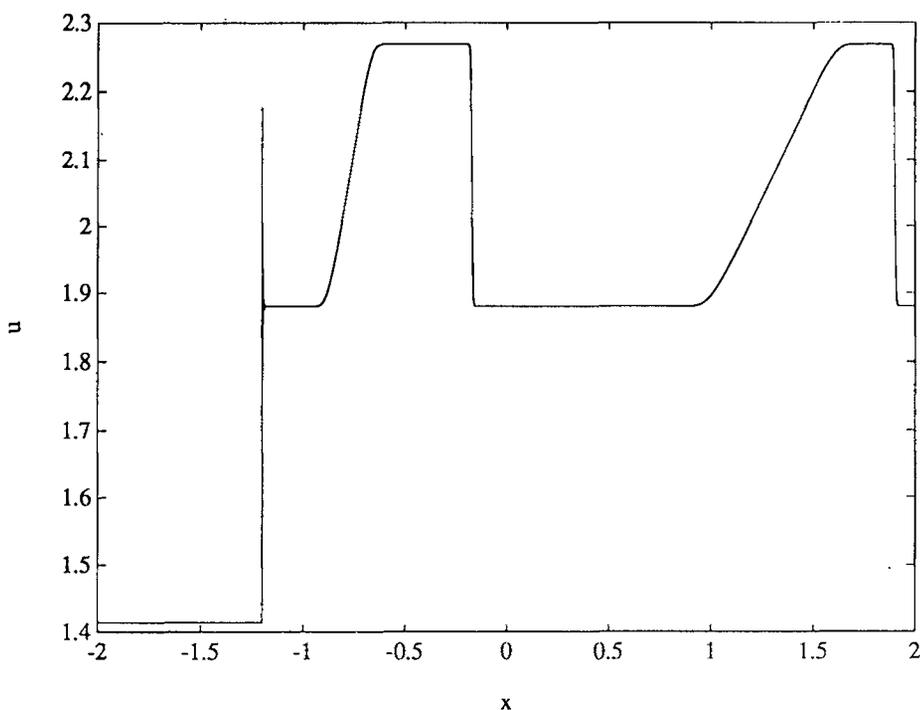


Figura 9. Experimento 3 en el tiempo $t = 4,4$.

En la Figura 9 se muestra la forma de u en el instante $t = 4,4$ para el experimento 3. Este experimento difiere del 2 en que los saltos de la llama son hacia adelante en las discontinuidades de x_f . Nótese que los “dientes” en u son ahora “hacia arriba”.

La Figura 10 muestra la forma de u en el instante $t = 6$ para el experimento 7b. En este experimento el choque precursor está “clavado” en $x = 3$ y $x_f = -1 - 0,5(u(3, t) - 2)$, donde $u = 2$ es el valor de equilibrio previo a la aparición de las perturbaciones. Puede observarse que un choque en u llegando a $x = 3$ produce un salto hacia atrás de la llama (como en la Figura 8), y que la perturbación se inicia porque $x_f = -1$ cuando $u = 2$, pero u_o salta de $\sqrt{2}$ a 2 en $x = 0$. En este experimento se notan pequeñas oscilaciones de alta frecuencia cerca de la llama, de carácter numérico.

En la Figura 11 se observa la forma de u en el tiempo $t = 10$ para el experimento 10b. Este experimento es similar al 7b, excepto que ahora $x_f = -2,5 + 0,5(u(3, t) - 2)$, de modo que la llama salta hacia adelante cuando un choque llega a $x = 3$. La perturbación se inicia porque la discontinuidad en u_o ocurre en $x = -2,4$, mientras que $x_f = -2,5$ para $u = 2$, de modo que las condiciones iniciales no corresponden a la onda cuadrada que se obtiene como solución exacta.

En la Figura 12 se observa la forma de u en el tiempo $t = 6$ para el experimento 12. Este es otro experimento con el choque precursor “clavado”, ahora en $x = 1$, con $x_f = 0,15(u(1, t) - 2)$. La perturbación inicial ocurre, como en los otros casos, porque la discontinuidad en las condiciones iniciales, en $x = -0,008$, no coincide con la posición inicial de la delta en $x = 0$. Nótese cómo esto finalmente se traduce en la generación de una serie de pulsos “diente de sierra” debidos a la realimentación de x_f por los valores de u en $x = 1$.

En la Figura 13 se ve la forma de u en el instante $t = 0,24$ para el experimento

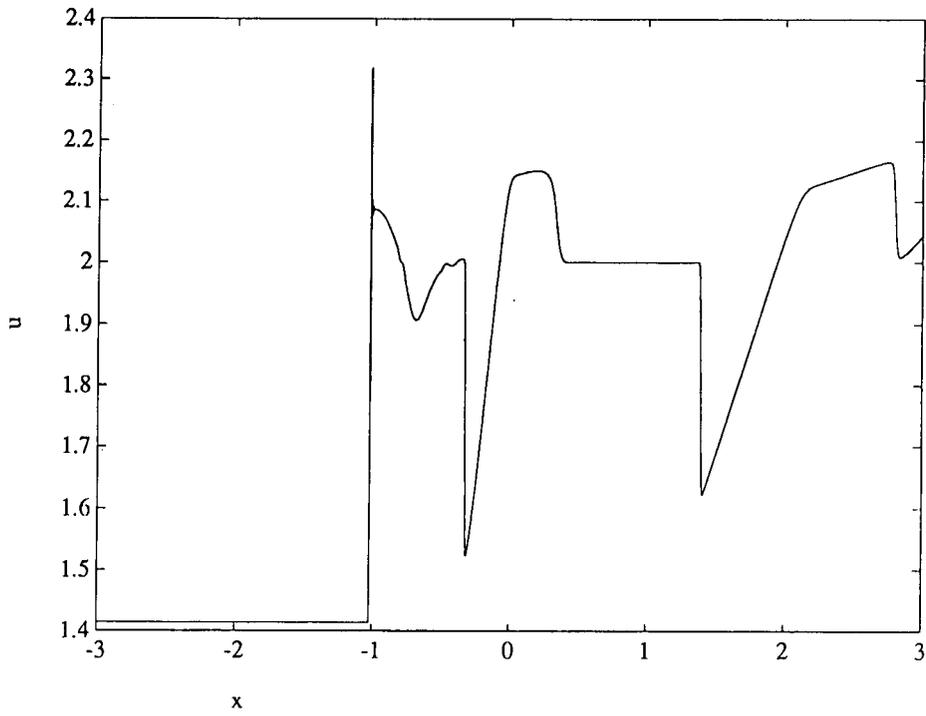


Figura 10. Experimento 7b en el tiempo $t = 6$.

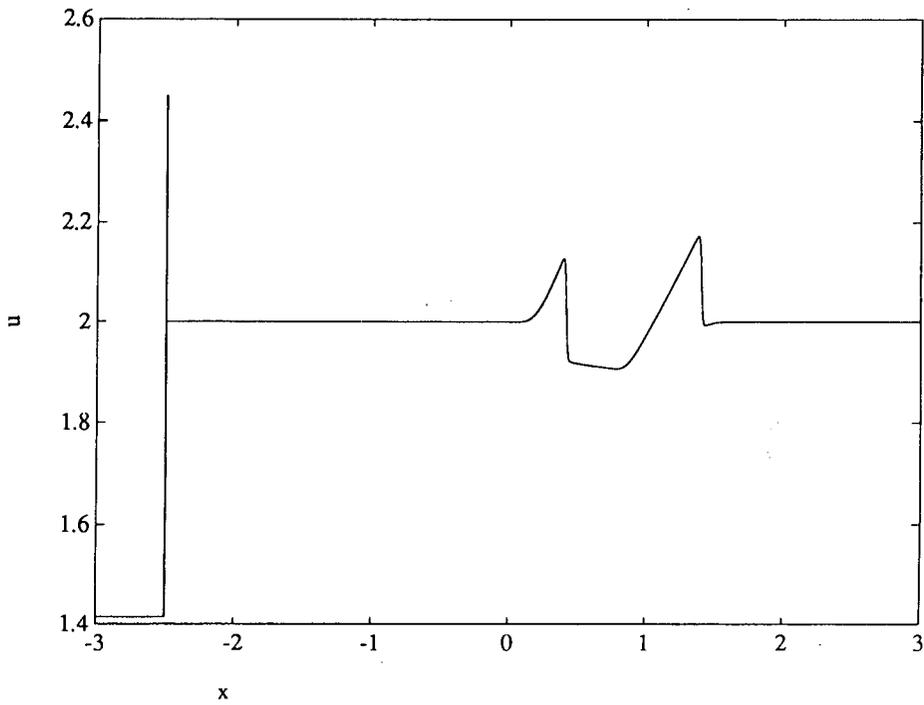
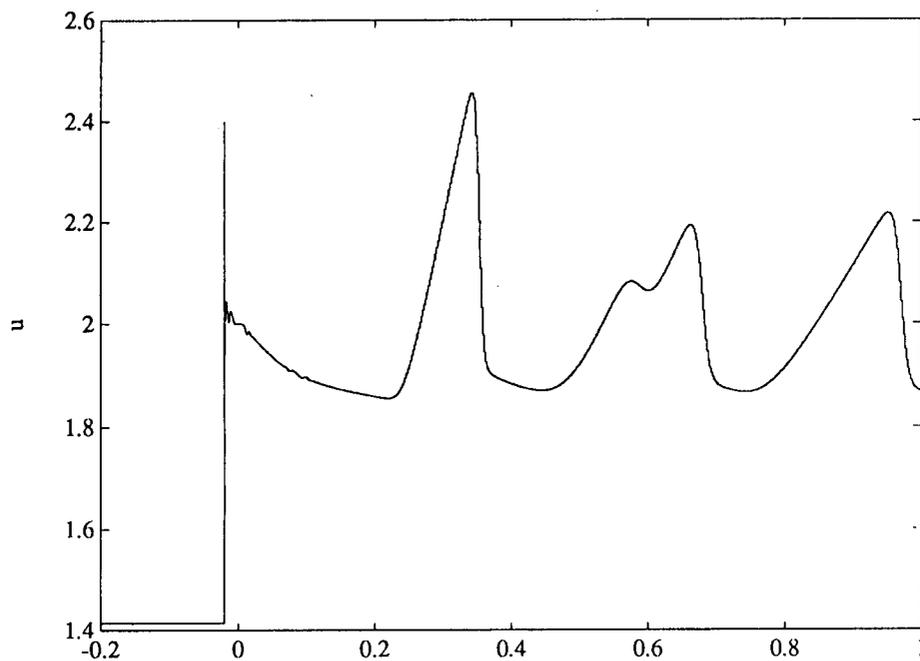
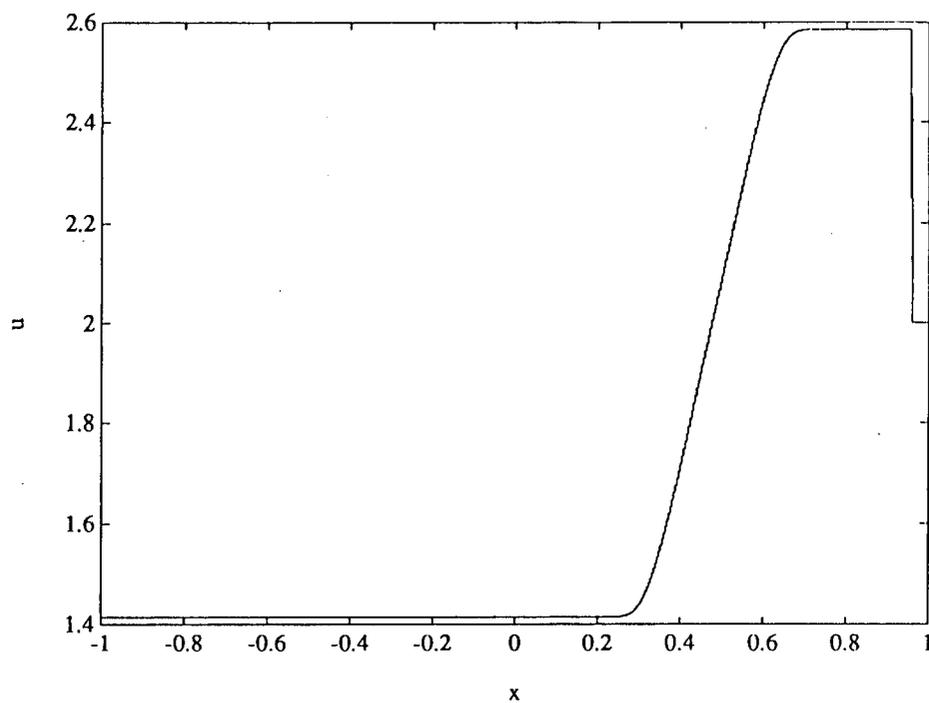


Figura 11. Experimento 10b en el tiempo $t = 10$.

Figura 12. Experimento 12 en el tiempo $t = 6$.Figura 13. Experimento 15 con $\alpha = 4$ en el tiempo $t = 0,24$.

15, con $\alpha = 4$. En este experimento estudiamos las oscilaciones que aparecen en el esquema de la fórmula (18), cuando la llama se mueve muy rápidamente. La solución exacta del problema $x_f = \alpha t$ con $u(x, 0) = \sqrt{2}$ para $x < 0$, $u(x, 0) = 2$ para $x > 0$ es fácil de obtener. Para $\alpha = 4$, la llama avanza un Δx por Δt y no hay casi oscilaciones.

La Figura 14 se diferencia de la Figura 13 en que ahora $\alpha = 16$: x_f avanza $4\Delta x$ por cada Δt . Se observan muchas oscilaciones cerca de la llama. La solución exacta se obtiene si se promedian las oscilaciones, lo que demuestra que la convergencia del esquema numérico cerca de la llama es "débil".

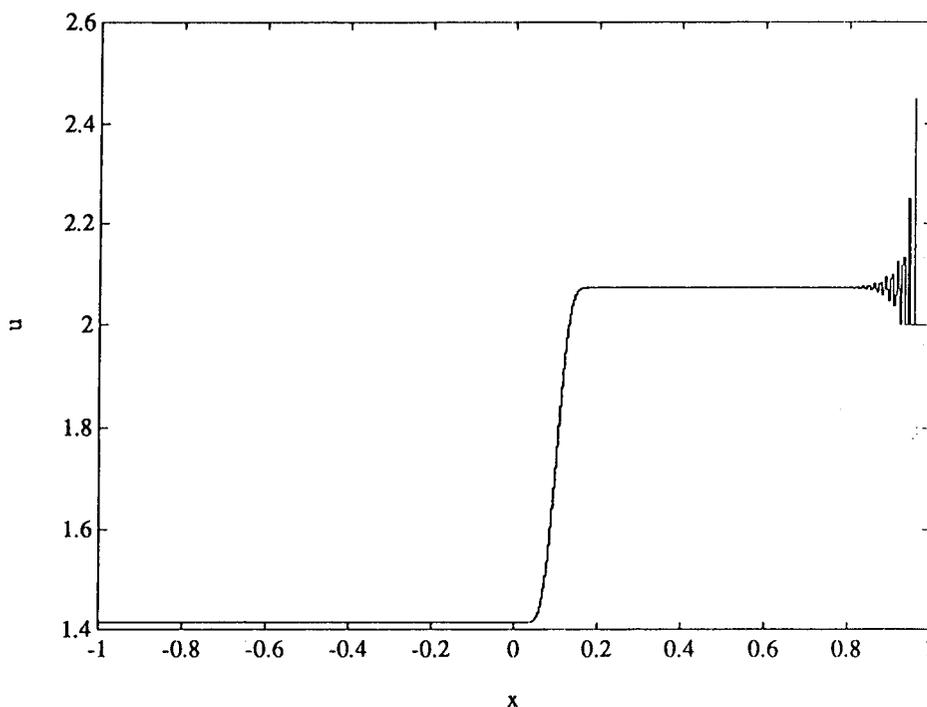


Figura 14. Experimento 15 con $\alpha = 16$ en el tiempo $t = 0,06$.

La Figura 15 – experimento 16 – se diferencia de la Figura 13 en que se usa el algoritmo numérico dado por las fórmulas (19) y (20). En este caso, para $\alpha = 1$ no hay oscilaciones detectables (comparar con la Figura 13, cerca de la posición de la llama $x_f = 0,96$).

Finalmente, la Figura 16 repite la Figura 15, siendo ahora $x_f = 16t$. Una comparación con la Figura 14 muestra que las oscilaciones son de amplitud considerablemente menor.

Los experimentos permiten observar lo siguiente: el esquema 1 (totalmente conservativo) y el esquema 2 (fórmula 18) no presentan prácticamente diferencias significativas a igualdad de intervalo espacial de resolución, por lo cual no vale la pena usar el esquema 1, más sofisticado (los experimentos 1 y 4, 5 y 6, y 7 y 8 se diferencian en los esquemas usados); en la malla más gruesa, cuando se usa, se nota bastante más viscosidad numérica que en la fina, por lo cual es preciso tener en cuenta en todo análisis detallado la viscosidad numérica, que puede influir en los resultados

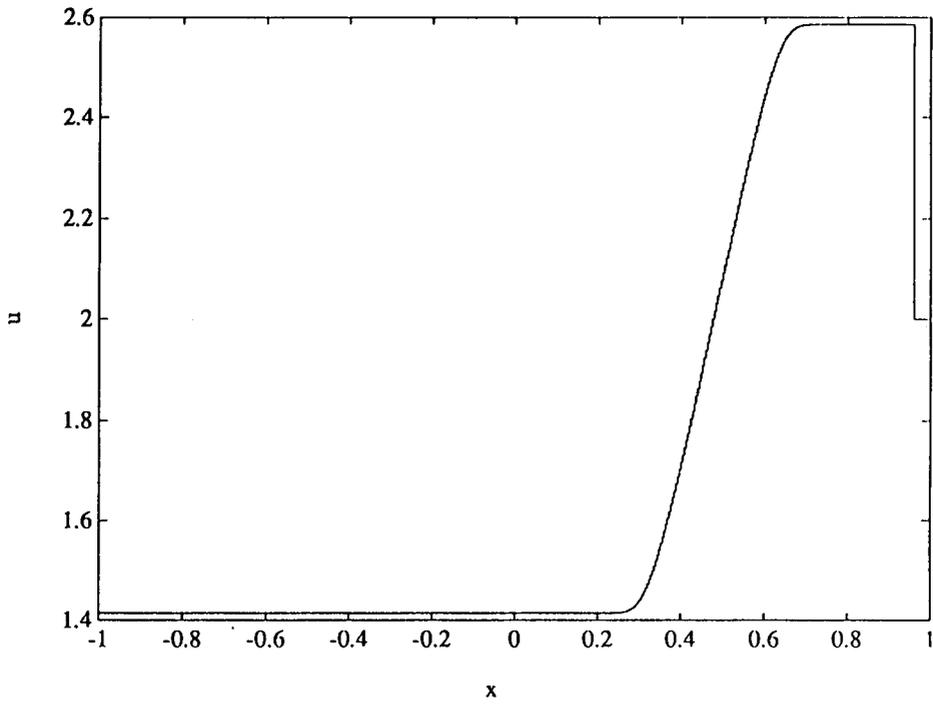


Figura 15. Experimento 16 con $\alpha = 4$ en el tiempo $t = 0,24$.

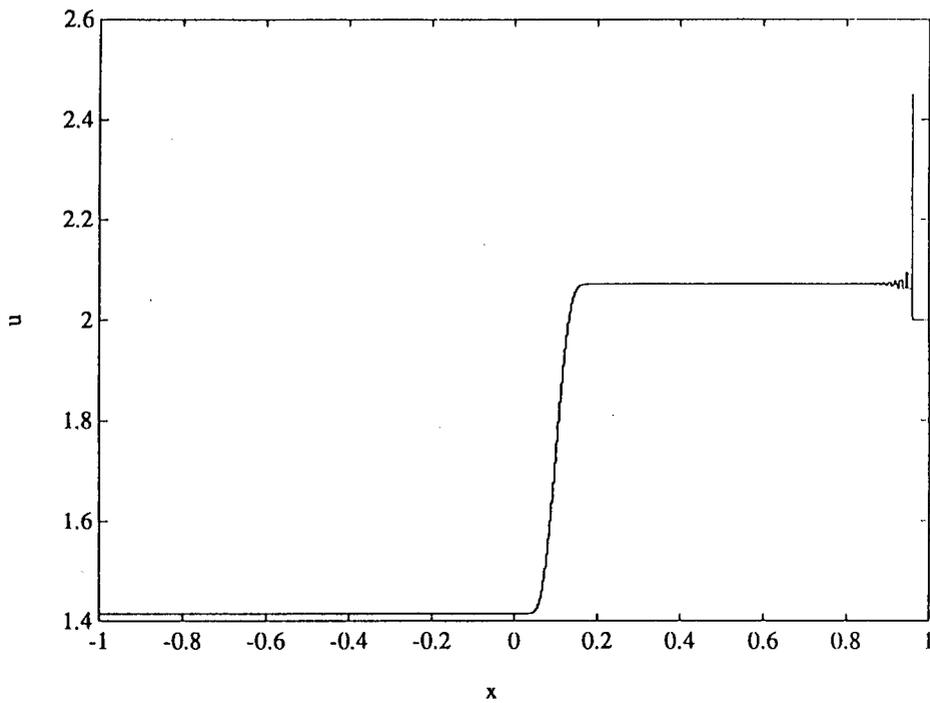


Figura 16. Experimento 16 con $\alpha = 16$ en el tiempo $t = 0,06$.

(por ejemplo, eso se nota en los experimentos 7 y 11, y 12, 13 y 14, diferenciados en la resolución). Algunas corridas se realizaron para comparar en la solución teórica (fácil de obtener cuando x_f es lineal en t), con resultados satisfactorios (experimentos 5, 6 y 9). Se nota la aparición de oscilaciones parásitas cerca de la llama. Por ese motivo se hicieron los experimentos 15, que permitieron comprobar que las oscilaciones son mayores para velocidades de la llama negativas, y aumentan con el valor absoluto de la velocidad de la llama (las oscilaciones son muy significativas para velocidad de la llama igual a 16). A partir de estas comprobaciones se diseñó el esquema 3, de paso fraccionario con distribución de masa generada por la llama en los intervalos que recorre en Δt (fórmulas 19 y 20). Los resultados permiten comprobar una significativa mejoría en las oscilaciones.

CONCLUSIONES

De todos los esquemas aquí propuestos, el que presenta la mejor combinación de precisión y simplicidad es el de pasos fraccionarios con consideración de los intervalos que atraviesa la llama. Con este esquema se reducen considerablemente las oscilaciones parásitas que aparecen por razones numéricas. Estamos implementando en este momento una modificación del método que permitirá filtrar y suprimir estas oscilaciones prácticamente por completo. La densificación es útil sobre todo cuando interesa mucha precisión cerca de la llama, e interesa la forma de la solución lejos de la llama. En ese caso, permite obtener información adicional con un costo marginal mínimo. El paso siguiente a encarar es lograr un orden de precisión mayor, para el cual usaremos un método de Godunov de orden superior y con malla de geometría espaciotemporal mucho más flexible que la actualmente en uso, según puede verse, por ejemplo, en la reciente tesis de Tabak¹⁴.

REFERENCIAS

1. D.L. Chapman, "On the rate of explosions in gases", *Philos. Mag.*, Vol. 47, pp. 90-104, (1899).
2. W. Doering, "On detonation processes in gases", *Ann. Phys.*, Vol. 43, pp. 421-436, (1943).
3. W. Fickett, "Detonation in miniature", en: J.D. Buckmaster (ed.), *The mathematics of combustion*, SIAM, Philadelphia, pp. 133-181, (1985).
4. S.K. Godunov, "Métodos en diferencias para el cálculo numérico de soluciones discontinuas de las ecuaciones de la dinámica de fluidos", *Mat. Sb.*, Vol. 47, pp. 271-306, (1959) (en ruso).
5. E. Jouguet, "On the propagation of chemical reactions in gases", *J. de Mathématiques Pures et Appliquées*, Vol. 1, pp. 347-425, (1905).
6. P.D. Lax, "Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves", *SIAM Regional Conference Series in Appl. Math.*, no. 11, (1973).
7. R. LeVeque, "Numerical methods for conservation laws", Birkhäuser Verlag, Basilea, (1991).

8. A. Majda, "A qualitative model for dynamic combustion", *SIAM J. Appl. Math.*, Vol. **43**, pp. 70–93, (1981).
9. J. von Neumann, "Theory of detonation waves", *Collected Works*, Vol. **6**, Pergamon Press, Londres, pp. 203–218, (1963).
10. R.R. Rosales, "Stability theory for shocks in reacting media: Match stems in detonation waves", *Lectures in Applied Mathematics*, Vol. **24**, pp. 431–465, (1986).
11. R.R. Rosales y A. Majda, "Weakly nonlinear detonation waves", *SIAM J. Appl. Math.*, Vol. **43**, pp. 1086–1118, (1983).
12. K.I. Shchelkin, "Two cases of unstable combustion", *Soviet Physics JETP*, Vol. **36**, pp. 416–420, (1959).
13. J. Smoller, "Shock waves and reaction-diffusion equations", Springer-Verlag, Nueva York, (1983).
14. E.G. Tabak, "Focusing of weak shock waves and the von Neumann paradox of oblique shock reflection", Ph. D. Dissertation, Department of Mathematics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, (1992).
15. R.M. Zaidel, "Estabilidad de ondas de detonación en mezclas gaseosas", *Dokl. Akad. Nauk SSSR* (Secc. Fís. Quím), Vol. **136**, pp. 1142–1145, (1961) (en ruso).
16. Ya. B. Zeldovich, "Sobre la teoría de propagación de detonaciones en sistemas gaseosos", *Zh. Èxsp. Teor. Fiz.*, Vol. **10**, pp. 542–568, (1940) (en ruso).