



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR
DE
INGENIEROS DE MINAS

Ríos Rosas, 21
28003 MADRID.

DEPARTAMENTO DE
MATEMÁTICA APLICADA Y MÉTODOS INFORMÁTICOS

PROGRAMA DE LA ASIGNATURA
MATEMÁTICAS DE LA COMBUSTIÓN

Curso	: Segundo ciclo	Créditos totales
Cuatrimestre	: 1º	Teóricos : 2,0
Carácter	: Libre Elección	Prácticos : 2,5

PLAN DE ESTUDIOS 1996

Edición 1: 2003-09-22

MATEMÁTICAS DE LA COMBUSTIÓN: PROGRAMA

a) OBJETIVOS Y CONTENIDOS

BLOQUE 1: Modelos matemáticos de la combustión

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- 1.1 *Comprender los Principios y Leyes de Conservación de la Dinámica de Fluidos y las Leyes de la Cinética Química que intervienen en el modelado de la Combustión.*
- 1.2 *Comprender los fundamentos de los Métodos Asintóticos para obtener modelos simplificados de Combustión.*
- 1.3 *Aplicar las técnicas de modelado y asintóticas para formular adecuadamente problemas particulares de Combustión.*

CONTENIDOS:

1.1: ANÁLISIS VECTORIAL PARA SU APLICACIÓN EN COMBUSTIÓN.

- Notación. Operadores gradiente, divergencia y de Laplace. Productos escalar, vectorial y tensorial. Teoremas de Gauss y de Green.

1.2: EL TEOREMA DEL TRANSPORTE. PRINCIPIOS Y LEYES DE CONSERVACIÓN

- Hipótesis generales de los medios continuos. El Teorema de Transporte de Reynolds. Principios de Conservación y su interpretación. Aplicación de los resultados del Análisis Vectorial a la deducción de Leyes de Conservación en el caso regular.

1.3: PRINCIPIOS DE CONSERVACIÓN DE LOS MEDIOS CONTINUOS

- El Principio de Conservación de la Masa. El caso de los fluidos reactivos: Principio de Conservación de las Especies. Ley Hidrodinámica de Conservación de la Masa. Leyes de Conservación Químicas.
- El Principio de Conservación de la Cantidad de Movimiento. Ley de Conservación de la Cantidad de Movimiento. Principio de Conservación del Momento.
- Principio de Conservación de la Energía. Ley de Conservación de la Energía o Primer Principio de la Termodinámica.

1.4: RELACIONES DE CIERRE DE LAS LEYES DE CONSERVACIÓN DE LOS MEDIOS CONTINUOS

- Leyes Constitutivas. Leyes de Fick y de Fourier. Relaciones Termodinámicas. Ecuaciones de Estado. Leyes de la Cinética Química: Ley de Arrhenius.

1.5: LAS LEYES DE CONSERVACIÓN DE LA COMBUSTIÓN

- Hipótesis de Química simplificada e Hipótesis de incompresibilidad: motivación y consecuencias. Adimensionalización. Números adimensionales y tiempos característicos. Modelos asintóticos: modelos de la Combustión de Sólidos, modelos de alta energía de activación, modelos cerodimensionales, modelos

estacionarios, modelos de la Combustión de Gases.

1.6: CASOS PARTICULARES Y EJERCICIOS

- Condiciones de Contorno e Iniciales. Ejercicios sobre el modelado de situaciones particulares en Combustión. Relación con otros dominios de la Ciencia y la Tecnología.

BLOQUE 2: Regímenes de combustión

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- 2.1 Analizar matemáticamente el modelo más simple de Combustión (Modelo de Seménov).*
- 2.2 Aplicar los métodos del Análisis para predecir y explicar la existencia de diferentes regímenes de combustión según el valor de los parámetros del sistema.*
- 2.3 Aplicar los recursos del Cálculo para predecir temperaturas de ignición y de combustión, así como la evolución temporal de la Combustión.*

CONTENIDOS:

2.1: EL MODELO DE SEMÉNOV

- El modelo cerodimensional de explosión térmica. Hipótesis asintóticas, parámetros y aplicaciones. Simplificación del modelo: cinética química de orden cero y modelo límite de alta energía de activación. Desacoplamiento de las ecuaciones de la energía y de la cinética química.

2.2: ESTUDIO DEL MODELO CON CINÉTICA DE ORDEN CERO

- Existencia y unicidad de solución. Existencia de estados estacionarios y puntos críticos del diagrama de bifurcación. Regímenes de combustión: combustión lenta, intermedia y explosiva. Dinámica del sistema: estimación de temperaturas de ignición, combustión y tiempos de explosión.

2.3: ESTUDIO DEL MODELO CON CINÉTICA DE ORDEN UNO

- Estudio asintótico del diagrama de bifurcación para altas energías de activación y grandes calores de reacción.

BLOQUE 3: Modelos de combustión de sólidos.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- 3.1 Comprender los fundamentos de los métodos de análisis de problemas semilineales elípticos y parabólicos.*
- 3.2 Aplicar los métodos del Análisis para predecir la existencia de regímenes de autocombustión y determinar sus límites.*
- 3.3 Aplicar los recursos del Cálculo para estimar temperaturas de ignición y combustión, así como tiempos máximos de existencia de combustión no explosiva.*

CONTENIDOS:

3.1: LOS MODELOS BÁSICOS

- Los modelos estacionarios de la Teoría de Frank-Kamenetskii: problemas de Gelfand y Gelfand perturbados. Modelos de evolución.

3.2: ANÁLISIS MATEMÁTICO DE LOS MODELOS ESTACIONARIOS

- Concepto clásico de solución, subsolución y sobresolución. Existencia y acotación de soluciones no negativas: Introducción a los métodos de comparación. Construcción de los diagramas de bifurcación y determinación de los límites de explosión térmica.

3.3: ANÁLISIS MATEMÁTICO DE LOS MODELOS DE EVOLUCIÓN

- Intervalos de existencia de solución. Unicidad. Determinación, en su caso, de los tiempos de explosión térmica.

BLOQUE 4: Estructura y propagación de llamas*OBJETIVOS ESPECÍFICOS:*

- 4.1 *Comprender los fundamentos de los métodos asintóticos para analizar cualitativamente problemas de EDPs con pequeños parámetros.*
- 4.2 *Aplicar los métodos asintóticos para comprender la estructura de los diferentes tipos de llama, así como para estimar paramétricamente su velocidad.*
- 4.3 *Aplicar los recursos del Cálculo para predecir la estructura de los diferentes tipos de llama, así como, en su caso, su velocidad.*

CONTENIDOS:

4.1: FRENTES DE REACCIÓN

- Planteamiento de un problema modelo unidimensional en combustión de sólidos. Existencia y dinámica de los frentes de reacción. Técnicas asintóticas para la estimación de la estructura y velocidad de propagación de los frentes de combustión.

4.2: CLASIFICACIÓN ASINTÓTICA DE LAS LLAMAS

- El caso de la combustión de gases. Justificación asintótica de la existencia de diferentes tipos de llama: llamas premezcladas y de difusión; llamas laminares y turbulentas.

4.3: LLAMAS PREMEZCLADAS

- Análisis asintótico de la estructura y velocidad de las llamas en el caso laminar. Comentarios sobre el caso turbulento.

4.4: LLAMAS DE DIFUSIÓN

- Estructura asintótica de las llamas de difusión. Influencia de la turbulencia.

BLOQUE 5: Deflagración y detonación.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- 5.1 *Comprender los fundamentos de los métodos de análisis de los sistemas de leyes de conservación hiperbólicos y cuasilineales.*
- 5.2 *Aplicar los métodos del Análisis para comprender la estructura de las ondas de combustión, y su diferenciación en ondas de deflagración y de detonación.*
- 5.3 *Aplicar los recursos del Cálculo para estimar los parámetros dinámicos de una onda de deflagración o de detonación.*

CONTENIDOS:

5.1: LEYES Y SISTEMAS DE LEYES DE CONSERVACIÓN

- Las ecuaciones reactivas de Euler como límite asintótico del caso general. Soluciones débiles y condiciones de Rankine-Hugoniot. El problema de Riemann.

5.2: SOLUCIONES DÉBILES ENTRÓPICAS

- El problema de la falta de unicidad. Entropía física y matemática. Soluciones entrópicas satisfaciendo las condiciones de Rankine-Hugoniot.

5.3: RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE RIEMANN

- Ondas de choque y discontinuidades de contacto.

5.4: LA TEORÍA DE CHAPMAN-JOUGUET PARA FLUJOS REACTIVOS

- Estudio simplificado de las ecuaciones unidimensionales de Euler en el caso límite de velocidad infinita de reacción. Ondas de combustión. Curvas de Hugoniot y rectas de Rayleigh. Rama de detonación y rama de deflagración. Puntos CJ. Deflagraciones y detonaciones fuertes y débiles.

5.5: INTRODUCCIÓN AL MODELO Z.N.D. PARA DETONACIONES

b) BIBLIOGRAFÍA

BÁSICA:

- BEBERNES, J.; EBERLY, D. *Mathematical Problems from Combustion*. Springer-Verlag, Applied Mathematical Sciences, 83, Nueva York, 1989.
- JONES, J.C. *Combustion Science. Principles and Practice*. Millennium Books, Londres, 1993.
- KUO, K.K. *Principles of Combustion*. John Wiley & Sons, Londres, 1986.

- VICENTE, S. de. *Modelos Matemáticos en Ecuaciones en Derivadas Parciales de la Física y la Ingeniería*. Cuadernos de Matemática Aplicada, nº1. Servicio de Publicaciones de la Universidad de Oviedo, Oviedo, 1996.
- ZELDOVICH, Y.B.; BARENBLAT, G.P.; LIBROVICH, V.B.; MAKHVILADZE, G.M.. *The Mathematical Theory of Combustion and Explosions*. Consultants Bureau, Paris, 1985.

AVANZADA:

- ÉRDI, P.; TÓTH, J.. *Mathematical Models of Chemical Reactions*. Manchester University Press, Manchester, 1989.
- GODLEWSKI, E.; RAVIART, P.A.. *Numerical Approximations of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*. Springer, Applied Mathematical Sciences, 118, Berlin, 1996.
- PAO, C.V.. *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations*. Plenum Publishing Corporation, Londres, 1990.
- SMOLLER, J. *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.

c) PRÁCTICAS EN GRUPOS REDUCIDOS

5 Prácticas en Aula de Informática de dos horas de duración cada una:

- **Práctica 1:** Familiarización con el entorno MATLAB y la Toolbox PDE.
- **Práctica 2:** Aproximación Numérica de Sistemas de EDOs provenientes de la Teoría de Seménov.
- **Práctica 3:** Aproximación Numérica de los Sistemas de EDPs que aparecen en la Teoría de Frank-Kamenetskii.
- **Práctica 4:** Aproximación Numérica de los Sistemas de EDPs que aparecen en las llamas premezcladas y de difusión.
- **Práctica 5:** Aproximación Numérica de las Ecuaciones Reactivas de Euler.

d) PROCEDIMIENTO DE EVALUACIÓN

La evaluación de los Estudiantes se realizará en base a los Ejercicios Teórico-Prácticos propuestos durante el Curso y entregados al Profesor, previo asesoramiento y discusión con el mismo:

- 3 Ejercicios Teórico-Prácticos propuestos en clase 75%.
- 1 Ejercicio Práctico de Simulación 25%.