



UNIVERSITAT ROVIRA
I VIRGILI

Escola Tècnica Superior
d'Enginyeria Química

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL
DE LA RIOJA

Escuela Superior de
Ingeniería y Tecnología

MÁSTER INTERUNIVERSITARIO EN
MECÁNICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

**DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE HERRAMIENTAS
NUMÉRICAS PARA CÁLCULOS DE
CARGA DE FUEGO**

TRABAJO PRESENTADO POR:

Sebastián Sánchez Riera

TIPO DE TRABAJO: Desarrollo Software de simulación y/o análisis

TUTORIZADO POR:

Jordi Pallarès Curto

Año académico 2022/2023

Agradecimientos

El presente Trabajo Final de Máster marca el final de mi etapa universitaria en el Máster Interuniversitario en Mecánica de Fluidos Computacional. Estos estudios han complementado mi formación académica en dicho ámbito y han reforzado las bases sentadas mediante mis estudios previos en Ingeniería Aeronáutica.

A lo largo de estos dos últimos años he compatibilizado mi carrera laboral en la industria con los estudios universitarios, lo que ha supuesto todo un reto a nivel personal. Sin embargo, mi motivación e ilusión por aprender, superarme y crecer como ingeniero ven hoy su recompensa con la finalización de este Trabajo Final de Máster. Por ello, me gustaría aprovechar esta ocasión para dar las gracias a todos aquellos que me han acompañado en este camino.

En primer lugar, me gustaría agradecer a la Universitat Rovira i Virgili y a la Universidad Internacional de La Rioja por haberme brindado la oportunidad de apasionarme con la Mecánica de Fluidos Computacional, así como por la formación recibida.

En este sentido, mención aparte merece mi familia, padres y hermano, por su apoyo incondicional.

Por último, pero no por ello menos importante, agradezco especialmente al Dr. Jordi Pallarès Curto tanto por la confianza depositada en mí como el soporte proporcionado para la realización del presente proyecto de investigación.

Resumen

Históricamente, la seguridad contra incendios ha sido objeto de estudio para multitud de aplicaciones ligadas a la ingeniería, como la construcción de túneles, edificios y vehículos ferroviarios, entre otros. Dentro de este contexto, la caracterización de la conocida como “curva de carga de fuego”, que establece la evolución temporal del calor emitido durante un eventual incendio, sigue siendo un punto de interés para los investigadores.

Actualmente, frente a los ensayos experimentales, a veces excesivamente costosos e imposibles de abordar, o los métodos analíticos, habitualmente poco precisos, los métodos computacionales han cobrado fuerza en la determinación de la curva de carga de fuego. Sin embargo, estas técnicas son costosas en términos de recursos informáticos y tiempo de simulación.

Por ello, con tal de reducir el coste computacional de dichos cálculos, el presente Trabajo Final de Máster ahonda en la comprensión de los fenómenos físicos involucrados en la propagación de un incendio. Sobre estas bases teóricas, se desarrollan y validan modelos simplificados CFD que permiten obtener de forma aproximada las principales características de la combustión de un sólido, es decir, sus etapas de calentamiento, pirólisis, ignición y propagación de la llama.

En particular, se ha desarrollado un solver bidimensional de la Ecuación de la Energía Térmica, donde se ha considerado el término transitorio y los flujos difusivos (conductividad) dentro del sólido. Además, como términos fuente se han introducido la aplicación de una fuente de calor externa y las pérdidas debidas a la emisividad de la materia, así como la radiación emitida por las celdas en las que se está produciendo el incendio y la energía invertida en pirolizar materia todavía no quemada. Así mismo, los diferentes escenarios simulados se validan con la herramienta computacional FDS (*Fire Dynamics Simulator*), de manera que se evalúa la precisión del código CFD desarrollado.

En este sentido, las predicciones obtenidas con el código CFD desarrollado, basado en una modelización simplificada de la llama mediante el “modelo del origen puntual”, presentan, en líneas generales, buena concordancia con las de la herramienta FDS que incorpora la simulación completa y rigurosa de la llama. Por ejemplo, la diferencia entre los dos códigos en la predicción del calor incidente en la zona externa de la llama es menor al 20 %. En contraposición, las mayores discrepancias, del orden del 60-80 %, se han encontrado en el calor incidente en el interior de la llama y el instante de inicio de pirólisis para el material circundante al frente de llama. Por su parte, la reducción del coste computacional está entorno al 5000 %.

Palabras clave: “Combustión de un sólido”, “Pirólisis”, “Propagación de una llama”, “Carga de Fuego”, “Incendios CFD”

Resum

Històricament, la seguretat contra incendis ha sigut objecte d'estudi per a multitud d'aplicacions vinculades a la ingenieria, com la construcció de túnels, edificis i vehicles ferroviaris, entre altres. Dins d'aquest contexte, la caracterització de la coneguda com "curva de càrrega de fòc", la qual defineix l'evolució temporal del calor generat durant un eventual incendi, continua siguent punt d'interés per als investigadors.

Actualment, en contraposició als assajos experimentals, a voltes excessivament costosos i impossibles d'abordar, o els mètodes analítics, habitualment poc precisos, els mètodes computacionals han cobrat força en la determinació de la curva de càrrega de fòc. No obstant això, aquestes tècniques són costoses en termes de recursos informàtics i temps de simulació.

Per això, amb tal de reduir el cost computacional d'aquests càlculs, el present Treball Fi de Màster aprofunditza en la comprensió dels fenòmens físics involucrats en la propagació d'un incendi. Sobre aquestes bases teòriques, es desenvolupen i validen models simplificats CFD que permeten obtenir de forma aproximada les principals característiques de la combustió de un sòlid, és a dir, les etapes de calfament, piròlisi, ignició i propagació de la flama.

En particular, s'ha desenvolupat un solver bidimensional de l'Equació de l'Energia Tèrmica, on s'ha considerat el terme transitori i els fluxos difusius (conductivitat) dins del sòlid. A més, com termes font s'han considerat l'aplicació d'una font externa de calor i les pèrdues a causa de l'emissivitat de la matèria, així com la radiació emitida per les cel·les on l'incendi s'està produint i l'energia invertida en pirolitzar matèria encara no cremada. Així mateix, els diferents escenaris considerats es validen mitjançant l'eina computacional FDS (*Fire Dynamics Simulator*), de manera que s'avalua la precisió del codi CFD desenvolupat.

En aquest sentit, les prediccions obtingudes amb el codi CFD desenvolupat, basat en una modelització simplificada de la flama mitjançant el "model de l'origen puntual", presenten, en línies generals, bona concordança amb les de l'eina FDS que incorpora la simulació completa i rigorosa de la flama. Per exemple, la diferència entre els dos codis en la predicció de la calor incident a la zona externa de la flama és menor al 20%. En contraposició, les majors discrepàncies, de l'ordre del 60-80%, s'han trobat en la calor incident a l'interior de la flama i l'instant d'inici de piròlisi per al material circumdant al front de flama. Per la seua banda, la reducció del cost computacional està al voltant del 5000%.

Paraules clau: "Combustió d'un sòlid", "Piròlisi", "Propagació d'una flama", "Càrrega de fòc", "Incendis CFD"

Abstract

Since its very beginning, fire protection has been studied for a wide variety of applications related to engineering, such as the construction of tunnels, building or railway vehicles, among others. Within this context, the characterization of the commonly known as “fire load curve”, which defines the time evolution of the heat released during a fire, is still a point of interest for researchers.

Nowadays, alternatively to the experimental tests, often too expensive and difficult to carry out, or the analytical methods, usually with a low accuracy, computational methods have arisen as a tool for determining the fire load curve. However, these techniques are costly in terms of computational resources and time.

Due to this reason, in order to reduce the computational cost of these simulations, this Master’s Thesis Project focuses on the understanding of the physical phenomena involved in the propagation of a fire. After that, simplified CFD models are developed and validated for obtaining approximately the main characteristics of a solid material combustion, i.e. heating, pyrolysis, fire ignition and flame propagation phases.

Specifically, a bidimensional solver for the Thermal Energy Equation has been developed, which considers the transient term and the diffusive fluxes (conduction) within the solid material. In addition, source term is composed by an external heat of source and emissivity losses from solid material, as well as the radiation heat emitted by the cells where the fire is taken place and the pyrolysis energy invested in unburnt material. Moreover, the scenarios that are simulated with this code are lately validated through the computational software FDS (*Fire Dynamics Simulator*), and hence the accuracy of the developed CFD code is evaluated.

In this sense, the predictions obtained with the developed CFD code, based on a simplified modeling of the flame using the “point source model”, exhibit, in general, good agreement with those of the FDS software which incorporates the complete and rigorous simulation of the flame. For example, the difference between the two codes in the prediction of the incident heat outside the flame is less than 20%. On the other hand, the largest discrepancies, which are about 60-80%, have been found in the incident heat inside the flame and the time to reach pyrolysis for the material surrounding the flame front. On the other hand, the reduction of the computational cost is around 5000%.

Keywords: “Solid combustion”, “Pyrolysis”, “Flame propagation”, “Fire load”, “Fire CFD”

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	III
Resum	V
Abstract	VII
Índice de figuras	XI
Índice de tablas	XV
Nomenclatura	XVII

I Memoria

1. Introducción	1
1.1. Contexto del proyecto	1
1.2. Motivación y justificación del estudio	2
1.3. Objetivos del estudio	3
1.4. Estructura del documento	3
2. Fundamentos teóricos	5
2.1. Introducción a la combustión	5
2.2. Proceso de combustión de la materia sólida	6
2.2.1. Descripción microscópica	6
2.2.2. Descripción macroscópica	7
2.3. Definición de la curva de carga de fuego	11
2.3.1. Ensayos experimentales	12
2.3.2. Modelos analíticos	13
2.3.3. Métodos computacionales	15
3. Metodología computacional	17
3.1. Fundamentos de la Mecánica de Fluidos Computacional	17
3.1.1. Etapas de una simulación	18
3.2. Planteamiento de problemas de flujos reactivos con combustión	20
3.3. Herramientas computacionales	21
3.3.1. Python®	21
3.3.2. ANSYS Fluent®	21

3.3.3. FDS®	22
3.3.4. SmokeView®	22
4. Desarrollo del código CFD	23
4.1. Planteamiento del problema	23
4.2. Descripción del método	24
4.2.1. Mallado	24
4.2.2. Discretización espacial de los flujos conductivos	24
4.2.3. Integrador temporal	25
4.2.4. Resolución del sistema matricial lineal	26
4.2.5. Criterios de convergencia	27
4.2.6. Guardado de los datos de la simulación	27
4.2.7. Aplicación del algoritmo de resolución	27
4.2.8. Post-proceso de la solución	27
4.3. Modelos de incendio	27
4.3.1. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante	27
4.3.2. Modelo #1 - Pirólisis	28
4.3.3. Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad	30
4.3.4. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama	32
5. Análisis de resultados y validación del código CFD	37
5.1. Caracterización del material sólido	37
5.2. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante	38
5.3. Modelo #1 - Pirólisis	41
5.4. Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad	43
5.5. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama	45
5.5.1. Estudio de independencia de malla	46
5.5.2. Estudio de independencia de discretización de llama	49
5.5.3. Comparativa de los submodelos de llama	54
6. Conclusiones y desarrollos futuros	57
6.1. Conclusiones	57
6.2. Desarrollos futuros	58
Bibliografía	I
Anexo I. Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos	I
I.1. Ecuaciones generales	I
I.2. Modelado de la turbulencia	IV
I.2.1. Introducción a la turbulencia	IV
I.2.2. Enfoques computacionales: RANS, LES y DNS	VII
I.2.3. Tratamiento de pared	XI

Índice de figuras

2.1. Introducción a la combustión - Evolución de la llama de un mechero Bunsen desde dosados ricos (llama difusiva) a dosados pobres (llama premezclada). Adaptada de [7].	6
2.2. Proceso de combustión de la materia sólida - Cinética de reacción de la pirólisis [12].	9
2.3. Proceso de combustión de la materia sólida - Imágenes ilustrativas de: (a) combustión latente, y (b) combustión con llama [11].	10
2.4. Proceso de la combustión de la materia sólida - Esquema ilustrativo de los flujos de calor involucrados en la combustión de una llama.	11
2.5. Ensayos experimentales - Esquema ilustrativo del Cono Calorimétrico [24].	12
2.6. Modelos analíticos - Ajuste del método exponencial frente a los datos experimentales del tercer ensayo del <i>METRO Project</i> [26].	14
2.7. Modelos analíticos - Envolventes de la curva de carga de fuego en función de la longitud del vehículo ferroviario según la según la normativa alemana "TRStrab Brandschutz" [27].	15
3.1. Fundamentos de la Mecánica de Fluidos Computacional - Etapas de una simulación CFD.	18
4.1. Planteamiento del problema - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el modelo CFD acerca de la combustión de un material sólido.	23
4.2. Modelos de incendio - Esquema de las funciones implementadas para el Modelo #0.	28
4.3. Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el Modelo #0.	28
4.4. Modelos de incendio - Esquema de las funciones implementadas para el Modelo #1.	30
4.5. Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el Modelo #1.	30
4.6. Modelos de incendio - Esquema de las funciones implementadas para el Modelo #2.	31
4.7. Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el Modelo #2.	32
4.8. Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del modelo del origen puntual para el cálculo del flujo emitido mediante radiación por una llama [34].	33
4.9. Modelos de incendio - Esquemas ilustrativos del modelo de origen puntual con: (a) Discretización en altura, y b) Discretización en altura y base.	34

4.10. Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el Modelo #3.	35
4.11. Modelos de incendio - Esquema de las funciones implementadas para el Modelo #3.	36
5.1. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Esquemas ilustrativos de las condiciones de contorno de: (a) Conducción pura en la dirección "X", (b) Conducción pura en la dirección "Y", y (c) Conducción con fuente de calor. . . .	38
5.2. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción pura en la dirección "X": (a) Evolución temporal de la temperatura media, (b) Perfil de la temperatura estacionaria en $Y = 1$ m, y (c) Perfil de la temperatura estacionaria en $X = 1$ m.	39
5.3. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción pura en la dirección "X": (a) Contorno de temperatura estacionaria del solver CFD, y (b) Contorno de temperatura estacionaria en ANSYS Fluent®.	39
5.4. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción pura en la dirección "Y": (a) Evolución temporal de la temperatura media, (b) Perfil de la temperatura estacionaria en $Y = 1$ m, y (c) Perfil de la temperatura estacionaria en $X = 1$ m.	39
5.5. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción pura en la dirección "Y": (a) Contorno de temperatura estacionaria del solver CFD, y (b) Contorno de temperatura estacionaria en ANSYS Fluent®.	40
5.6. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción con fuente de calor: (a) Evolución temporal de la temperatura media, (b) Perfil de la temperatura estacionaria en $Y = 1$ m, y (c) Perfil de la temperatura estacionaria en $X = 1$ m.	40
5.7. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción con fuente de calor: (a) Contorno de temperatura estacionaria del solver CFD, y (b) Contorno de temperatura estacionaria en ANSYS Fluent®.	41
5.8. Modelo #1 - Pirólisis - Esquema ilustrativo de las condiciones de contorno de: (a) Fuente de calor uniforme, y (b) Fuente de calor en el centro del dominio.	41
5.9. Modelo #1 - Pirólisis - Comparativas para fuente de calor uniforme de: (a) Evolución temporal de la temperatura media, y (b) Evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.	42
5.10. Modelo #1 - Pirólisis - Comparativas para fuente de calor en el centro del dominio de: (a) Evolución temporal de la temperatura media, y (b) Evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.	42
5.11. Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad - Esquema ilustrativo de las condiciones de contorno de: (a) Fuente de calor uniforme, y (b) Fuente de calor en el centro del dominio.	43
5.12. Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad - Comparativas para fuente de calor uniforme de: (a) Evolución temporal de la temperatura media, y (b) Evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.	44
5.13. Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad - Comparativas para fuente de calor en el centro del dominio de: (a) Evolución temporal de la temperatura media, y (b) Evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.	45
5.14. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Esquema ilustrativo de las condiciones de contorno.	46

5.15. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para: (a) Calor incidente en el exterior de la llama, (b) Calor incidente en el interior de la llama, y (c) Calor incidente en todo el suelo del dominio.	47
5.16. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para: (a) Temperatura media en el exterior de la llama, y (b) Masa sólida en el exterior de la llama.	48
5.17. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio del calor incidente para el "modelo del origen puntual" en: (a) $Y = 0,975$ m, (b) $Y = 0,775$ m, y (c) $Y = 0,275$ m.	49
5.18. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Ratio del calor incidente para el "modelo del origen puntual".	50
5.19. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio del calor incidente para el "modelo del origen puntual con discretización en altura" ($n_{z,fire} = 32$) en: (a) $Y = 0,975$ m, (b) $Y = 0,775$ m, y (c) $Y = 0,275$ m.	51
5.20. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Ratio del calor incidente para el "modelo del origen puntual con discretización en altura" ($n_{z,fire} = 32$).	52
5.21. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio del calor incidente para el "modelo del origen puntual con discretización en altura y base" ($n_{x,fire} = n_{y,fire} = 64$) en: (a) $Y = 0,975$ m, (b) $Y = 0,775$ m, y (c) $Y = 0,275$ m.	53
5.22. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Ratio del calor incidente para el "modelo del origen puntual con discretización en altura y base" ($n_{x,fire} = n_{y,fire} = 256$).	54
5.23. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Contornos de la simulación FDS [®] para: (a) Forma de la llama, y (b) Temperatura del suelo.	55
I.1. Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos - Esquema descriptivo de: (a) rangos y escalas espaciales de la turbulencia, y (b) modelado de la turbulencia según el enfoque computacional.	VI
I.2. Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos - Leyes para el tratamiento de la pared. Adaptada de [50].	XII
I.3. Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos - Esquema descriptivo de: (a) resolución de la capa límite, y (b) modelado de la capa límite mediante funciones de pared. Adaptada de [53].	XIII

Índice de tablas

2.1. Modelos analíticos - Ecuaciones de la envolvente de la curva de carga de fuego según la normativa alemana “TRStrab Brandschutz” [27].	15
5.1. Caracterización del material sólido - Resumen de las propiedades físicas del polietileno de alta densidad (C ₂ H ₄) _n	37
5.2. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para calor incidente en el exterior de la llama.	47
5.3. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para calor incidente en el interior de la llama.	48
5.4. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para calor incidente en todo el suelo.	48
5.5. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para temperatura media e instante de inicio de la pirólisis.	49
5.6. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Análisis de los parámetros globales para el “modelo del origen puntual”.	50
5.7. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de discretización de llama para “modelo de origen puntual con discretización en altura”.	51
5.8. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Análisis de los parámetros globales para el “modelo del origen puntual con discretización en altura” (n _{z,fire} = 32).	52
5.9. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de discretización de llama para “modelo de origen puntual con discretización en altura y base”.	53
5.10. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Análisis de los parámetros globales para el “modelo del origen puntual con discretización en altura y base” (n _{x,fire} = n _{y,fire} = 256).	54
5.11. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Comparativa entre los submodelos de llama.	54

Nomenclatura

Abreviaciones

A	—	Factor pre-exponencial	[m/s]
A_i	—	Superficie expuesta del material i-ésimo	[m ²]
A_{inc}	—	Superficie sobre la que incide un flujo de calor	[m ²]
A_{llama}	—	Área de la llama	[m ²]
C_p	—	Calor específico	[J/(kg·K)]
$C_{p,\infty}$	—	Calor específico del aire ambiente	[J/(kg·K)]
D	—	Diámetro equivalente del área de incendio o llama	[m]
E_a	—	Energía de activación	[J/mol]
E_{tot}	—	Energía total liberada	[J]
g	—	Aceleración de la gravedad total liberada	[m/s ²]
H	—	Altura de la llama	[m]
HRR	—	<i>Heat Release Rate</i>	[W]
HRR_{max}	—	<i>Maximum Heat Release Rate</i>	[W]
HRR_{mean}	—	<i>Mean Heat Release Rate</i>	[W]
$HRRPUA$	—	<i>Heat Release Rate per Unit Area</i>	[W/m ²]
k	—	Conductividad térmica	[W/(m·K)]
k_{SGS}	—	Energía cinética turbulenta modelada (<i>sub-grid scale</i>)	[m ² /s ²]
L_{ref}	—	Escala del problema	[m]
L_λ	—	Escala de Taylor de la turbulencia	[m]
L_μ	—	Escala de Kolmogorov de la turbulencia	[m]
L_0	—	Escala integral de la turbulencia	[m]
m_i	—	Masa combustible del material i-ésimo	[kg]
\dot{m}_f	—	Flujo de masa de combustible consumida	[kg/s]
\dot{m}_p''	—	Flujo de masa pirolizada por unidad de área	[kg/(s·m ²)]
$n_{x,fire}$	—	Discretización de la llama en dirección X	[-]
$n_{y,fire}$	—	Discretización de la llama en dirección Y	[-]
$n_{z,fire}$	—	Discretización de la llama en dirección Z	[-]
p	—	Presión estática	[Pa]
Q^*	—	Calor adimensional de la correlación de Heskestad	[-]
\dot{q}_{emis}	—	Calor de radiación debido a la emisividad	[W]
\dot{q}_{ext}	—	Fuente de calor externo	[W]

Nomenclatura

\dot{q}_f	— Calor liberado por la combustión	[W]
$\dot{q}_{f,c}$	— Calor liberado por la combustión mediante convección	[W]
$\dot{q}_{f,r}$	— Calor liberado por la combustión mediante radiación	[W]
$\dot{q}_{f,r,abs}$	— Calor absorbido proveniente de la radiación de una llama	[W]
\dot{q}_s	— Fuente de calor	[W]
\dot{q}_c''	— Flujo de calor convectivo	[W/m ²]
$\dot{q}_{f,r,inc}''$	— Flujo de calor incidente de la radiación de una llama	[W/m ²]
\dot{q}_r''	— Flujo de calor de radiación	[W/m ²]
\dot{q}_{emis}'''	— Calor volumétrico de radiación debido a la emisividad	[W/m ³]
\dot{q}_{ext}'''	— Fuente volumétrica de calor externo	[W/m ³]
$\dot{q}_{f,r,abs}'''$	— Calor volumétrico absorbido proveniente de la radiación de una llama	[W/m ³]
\dot{q}_s'''	— Fuente volumétrica de calor	[W/m ³]
R	— Constante universal de los gases ideales	[J/(mol·K)]
Re	— Número de Reynolds	[-]
Re_λ	— Número de Reynolds de la escala de Taylor	[-]
Re_μ	— Número de Reynolds de la escala de Kolmogorov	[-]
Re_0	— Número de Reynolds de la escala integral	[-]
T	— Temperatura	[K]
T_∞	— Temperatura ambiente	[K]
t_{fire}	— Duración del incendio	[s]
u	— Velocidad del flujo	[m/s]
u_τ	— Velocidad de fricción	[m/s]
u^+	— Velocidad escalada con la velocidad de fricción	[-]
V_e	— Volumen de una celda del dominio computacional	[m ³]
y	— Distancia normal a la pared	[m]
y^+	— Distancia adimensional normal a la pared	[-]

Letras griegas

ϵ	— Ratio de disipación de la energía cinética turbulenta	[J/(kg·s)]
η	— Eficiencia de la combustión	[-]
κ	— Número de onda	[1/m]
μ	— Viscosidad dinámica	[kg/(m·s)]
μ_t	— Viscosidad dinámica turbulenta	[kg/(m·s)]
ν	— Viscosidad cinemática	[m ² /s]
ν_t	— Viscosidad cinemática turbulenta	[m ² /s]
ρ	— Densidad	[kg/m ³]
ρ_∞	— Densidad ambiente	[kg/m ³]
χ_c	— Fracción de calor emitido por convección	[-]
χ_r	— Fracción de calor emitido por radiación	[-]
Δ_e	— Tamaño filtro espacial LES	[m]
ΔH_c	— Energía de combustión total	[J/kg]

ΔH_{ch}	— Energía de combustión química	[J/kg]
ΔH_v	— Energía de vaporización por unidad de masa	[J/kg]

Siglas

CAD	— <i>Computer-aided Design</i>
CAE	— <i>Computer Assisted Engineering</i>
CFD	— <i>Computational Fluid Dynamics</i>
CFL	— <i>Courant-Friedrichs-Levy Number</i>
DNS	— <i>Direct Numerical Simulation</i>
FDM	— <i>Finite Difference Method</i>
FDS	— <i>Fire Dynamics Simulator</i>
FEA	— <i>Finite Element Analysis</i>
FEM	— <i>Finite Element Method</i>
FVM	— <i>Finite Volume Method</i>
GUI	— <i>Graphical User Interface</i>
LES	— <i>Large Eddy Simulation</i>
PCI	— Protección Contra Incendios
RANS	— <i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
RSM	— <i>Reynolds Stress Models</i>
SGS	— <i>Subgrid-scale</i>
SI	— Sistema Internacional

Notación matemática

$\bar{\phi}$	— Media temporal
ϕ'	— Fluctuación temporal
$\vec{\phi}$	— Vector
$\hat{\phi}$	— Vector unitario
$\vec{\nabla} \cdot (\vec{\phi})$	— Divergencia
$\vec{\nabla}(\phi)$	— Gradiente
$\frac{D(\phi)}{Dt}$	— Derivada total
$\underline{\phi}$	— Operador matricial

Parte I

Memoria

Capítulo 1

Introducción

En este primer capítulo se introduce el contexto del presente Trabajo Final de Máster. Así mismo, se detallan la motivación, justificación y objetivos del proyecto, para finalmente presentar la estructura de la memoria presentada.

1.1. Contexto del proyecto

El descubrimiento del fuego ha sido uno de los hitos más importantes en la historia de la humanidad. Las teorías más extendidas indican que el *Homo erectus* aprovechó fenómenos naturales como los rayos de las tormentas o las erupciones de los volcanes para conseguir fuego hace 1,6 millones de años. Sin embargo, los análisis apuntan a que su uso intencionado mediante la frotación de la madera contra un tronco o golpeando dos rocas para provocar una chispa data de hace unos 800 mil años [1].

Desde entonces, el uso del fuego ha estado vinculado al desarrollo de la vida cotidiana de la especie humana, de manera que supuso un cambio en la alimentación, una mejoría notable en la salud y una fuente de luz y calor, entre otros. Sin embargo, a día de hoy, la manipulación y control del fuego es un punto todavía crítico, sobre todo en situaciones extremas causadas por catástrofes o accidentes que desembocan en incendios incontrolados.

Para minimizar los riesgos ante dichas situaciones problemáticas, la **Protección Contra Incendios** (PCI) cobra fuerza. Esta se define como el conjunto de medidas definidas dentro de un sistema o plan de seguridad con objeto de minimizar los efectos de un eventual incendio para proteger a las personas y bienes [2]. Su ámbito de aplicación es variado y se extiende a la construcción de edificios civiles, construcción de túneles o vehículos ferroviarios, entre otros. En este sentido, el marco normativo existente es amplio y se cuenta con legislaciones como el Reglamento de Instalaciones de Protección Contra Incendios (aprobado por el Real Decreto 513/2017, 22 de mayo), el Real Decreto 2267/2004 de 3 de diciembre o el Código Técnico de Edificación (CTE, aprobado por el Real Decreto 314/2006, 17 de marzo) para establecimientos y edificios [3]; o la normativa europea de fuegos y humos EN-45545 y de impacto medioambiental REACH para el sector ferroviario [4].

A modo de ejemplo y centrándonos en el ámbito ferroviario, han emergido multitud de programas de investigación a nivel europeo e internacional con tal de ahondar en las consecuencias de un incendio dentro de un vehículo ferroviario, fenómeno especialmente crítico en tramos con túneles. En este marco, cabe destacar el programa europeo EUREKA, el cual llevó a cabo una intensa campaña de ensayos durante los años 1990 y 1992 [5].

Dichos tests en vehículos reales consistían en reproducir un incendio en su interior, lo que permitió mediante una sensorización adecuada obtener datos acerca de las temperaturas alcanzadas, visibilidad y concentraciones de gases como O_2 , CO_2 , CO , NO_x ... Estos datos experimentales han sido posteriormente empleados por algunos investigadores para desarrollar modelos analítico-estadísticos para la estimación de la **curva de carga de fuego**, es decir, la evolución temporal del calor emitido durante un eventual incendio [6].

Dentro de este contexto, ha irrumpido con fuerza una tercera vía frente a los ensayos experimentales, excesivamente costosos y frecuentemente imposibles de abordar, y las expresiones analíticas, habitualmente poco precisas y genéricas: los **métodos computacionales CFD**. El desarrollo de la informática y de los computadores a lo largo de los años ha permitido la evolución de la mecánica de fluidos computacional o técnicas CFD (en inglés, *Computational Fluid Dynamics*). Estas herramientas permiten simular problemas que involucren el movimiento de fluidos sin necesidad de realizar experimentos ni disponer de un área de ensayos. Además, permiten reproducir las condiciones operacionales del problema y obtener resultados sin el uso de técnicas intrusivas que puedan alterar la evolución del flujo.

En este campo, el programa de simulación más extendido para la caracterización de los incendios es el FDS[®] (*Fire Dynamics Simulator*), programa open-source desarrollado por el NIST (*National Institute of Standards and Technology*) en los años 2000. FDS[®] resuelve numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes simplificadas para flujo incompresible, incluyendo la ecuación de la energía térmica con especial énfasis en la resolución del transporte de calor generado por una llama. Sin embargo, para ello, resulta necesario la implementación de un modelo de turbulencia LES, así como el tratamiento de la reacción química que gobierna el proceso de combustión, lo que acaba resultando en simulaciones muy costosas en términos de recursos computacionales y tiempos de cálculo. Este hecho obliga a continuar investigando acerca de los fenómenos físicos involucrados en un incendio, para así desarrollar **herramientas CFD simplificadas**; contexto en el que se incluye el presente Trabajo Final de Máster.

1.2. Motivación y justificación del estudio

El ámbito de la Mecánica de Fluidos Computacional está en constante crecimiento, tanto en su dimensión científica y técnica como en el número de aplicaciones industriales y medioambientales en las que se emplea. En la actualidad, los avances tecnológicos más innovadores y pioneros dependen en buena medida de la implementación y el uso de herramientas avanzadas de simulación numérica aplicadas al campo de la ingeniería. En este sentido, sus ventajas son múltiples, ya que permiten resolver problemas de elevada complejidad sin necesidad de realizar medidas intrusivas o experimentos costosos.

En concreto, este proyecto nace de la necesidad de obtener con cierto grado de precisión las características fundamentales de un incendio, es decir, la curva de carga de fuego y la velocidad de propagación de la llama. El estado del arte implica, para ello, el uso de simulaciones CFD con un coste computacional elevado. Por tanto, el interés del presente Trabajo Final de Máster reside en la **posibilidad de desarrollar un código CFD simplificado** que resuelva la ecuación transporte de la energía térmica en una masa sólida junto con las condiciones de contorno adecuadas, de manera que proporcione con un grado aceptable de precisión y tiempos de cálculo moderados la información necesario para caracterizar la combustión de la materia sólida.

A nivel personal, este Trabajo Final de Máster supone la extensión de mis conocimientos dentro del mundo de la Protección Contra Incendios, área en la que he ejercido como ingeniero especialista para el sector ferroviario a lo largo de mi vida laboral. Así mismo, el auge de la Mecánica de Fluidos Computacional se ve reflejada en un incremento de la demanda de profesionales altamente cualificados en dicho ámbito, ardua tarea a causa de la naturaleza multidisciplinar de esta área del conocimiento. Intervienen los campos de la Mecánica de Fluidos, los métodos numéricos, la programación y el diseño gráfico, entre otros, todo ello dentro de un marco condicionado por la potencia de cálculo disponible (estado del arte de la informática y tecnología). A su vez, sus aplicaciones son amplias, siendo las técnicas CFD empleadas en la industria aeronáutica, energética, química o naval, así como en el sector de la automoción y ferroviario, el medioambiente o la biomedicina y salud.

1.3. Objetivos del estudio

En este contexto, el propósito del presente Trabajo Final de Máster es el **desarrollo y validación de herramientas numéricas para cálculos de carga de fuego**, de manera que se determinan las características fundamentales de un incendio genérico sobre un material sólido.

La naturaleza multi-física de este problema, el cual combina los efectos convectivos del aire a causa del gradiente de temperaturas existente en una combustión con la reacción química de la llama y su velocidad de propagación sobre un sólido (efectos difusivos y pirólisis), hace necesario el empleo de una gran cantidad de recursos computacionales para su correcta resolución mediante herramientas CFD. Por ello, con tal de aligerar este tipo de cálculos se desarrolla un código CFD simplificado que únicamente resuelve la ecuación de energía pero modelando adecuadamente todos los fenómenos físicos implicados (ya mencionados).

A continuación se presentan una serie de hitos más concretos que aúna este proyecto y que permiten alcanzar el propósito último mencionado.

- Elaboración del marco teórico entorno a la fenomenología del proceso de combustión de un sólido (modelo de llama, modelo de disipación del calor de combustión en forma de radiación y convección de la llama, pirólisis, etc).
- Descripción de la metodología numérica empleada, la cual se fundamenta en el uso de las técnicas de la Mecánica de Fluidos Computacional.
- Desarrollo de las herramientas numéricas CFD para el cálculo de carga de fuego y descripción de sus hipótesis.
- Validación del código CFD desarrollado mediante el uso del programa FDS[®].

1.4. Estructura del documento

En esta sección se muestra la estructura del documento, el cual se divide a su vez en un único documento o parte: I) Memoria, el cual se estructura en capítulos y anexos.

Parte I. Memoria

La memoria del Trabajo Final de Máster se organiza en los siguientes capítulos y anexos:

- En el Capítulo 1 se ha descrito el contexto en el que se enmarca el proyecto, así como la motivación y justificación del interés en dicha línea de investigación. Así mismo, se exponen los objetivos a alcanzar a lo largo de su desarrollo, así como la estructura del documento final presentado.
- En el Capítulo 2 se exponen los fundamentos teóricos, cuyo conocimiento es necesario para alcanzar una completa y correcta comprensión de la física que interviene en la combustión de un material sólido. Para ello, se introduce en primer lugar la tipología de las llamas existentes en los procesos de combustión, para posteriormente profundizarse en las etapas presentes en la combustión de un material sólido. Tras esto se describen las técnicas existentes para el cálculo de la curva de carga de fuego de un incendio generalizado.
- En el Capítulo 3 se presenta la metodología numérica empleada, la cual se fundamenta en las técnicas de la Mecánica de Fluidos Computacional, haciéndose especial énfasis en los problemas de combustión. Además, se tratan las herramientas computacionales empleadas para el cálculo CFD (FDS[®]) y la visualización de resultados (SmokeView[®]), así como el lenguaje de programación usado para el desarrollo del código CFD simplificado (Python[®]).
- En el Capítulo 4 se muestra el desarrollo del código CFD programado para este proyecto. En este sentido, se presentan las diferentes hipótesis planteadas, así como los diferentes modelos implementados.
- En el Capítulo 5 se exponen los diferentes escenarios simulados junto con su pertinente análisis de resultados. Así mismo, se muestra el proceso de validación llevado a cabo mediante la herramienta FDS[®].
- En el Capítulo 6 se recogen las principales conclusiones extraídas a partir de los resultados obtenidos a lo largo del proyecto, así como los posibles desarrollos futuros y puntos abiertos de la línea de investigación.
- En el Anexo I se recogen las ecuaciones fundamentales de la Mecánica de Fluidos junto con el modelado de la turbulencia.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

La primera etapa en un trabajo de investigación consiste en la revisión bibliográfica, basada en el estudio de los antecedentes y teorías existentes en el ámbito de estudio. Específicamente, este Trabajo Final de Máster se engloba en el campo de la combustión y protección contra incendios, de manera que el marco teórico detallado a continuación se centra en su descripción.

En primer lugar, se introducen los principios básicos de la combustión, para posteriormente describir en profundidad las etapas diferenciadas en el proceso de combustión de un material sólido. En concreto, se enfatiza en el tratamiento macroscópico del problema, remarcándose los conceptos fundamentales para su correcto análisis y estudio. Finalmente, se detallan las técnicas existentes para el cálculo de la curva de carga de fuego en un incendio generalizado.

2.1. Introducción a la combustión

La combustión es una materia sobre la que existe multitud de material científico y de investigación publicado, ya que implica una amplia variedad de fenómenos y procesos. Por ello, no existe una única acepción para el concepto de “combustión”. Por ejemplo, una definición ampliamente extendida a nivel académico dicta lo siguiente: “La combustión es una reacción química redox (reducción-oxidación) y a elevada temperatura entre un **combustible** (el reductor que se oxida) y el **oxidante** (que se reduce), habitualmente aire atmosférico” [7].

Otra manera de definir el proceso de combustión, desde un enfoque microscópico, es como “la **reorganización de átomos** y, por tanto, de enlaces covalentes entre reactivos y productos” [7]. Esto significa que las reacciones nucleares no implican un proceso de combustión, dado que el número de átomos no permanece invariante. Sin embargo, las reacciones químicas, que eventualmente podrían involucrar un proceso de combustión si un combustible y un oxidante están presentes, solo reorganizan los átomos (elementos) para formar nuevas moléculas (especies), i.e. se conserva el número de átomos.

A raíz de las definiciones introducidas, queda patente la intervención e interacción de la física con la química durante la combustión. Por un lado, los fenómenos de transferencia de masa y energía junto con los procesos termo-fluidodinámicos representan la física. Por otro lado, la química es determinante en la generación de gases contaminantes, así como en la producción de calor o apagados de llama.

Según la naturaleza del proceso de combustión, pueden distinguirse dos categorías, las cuales se reflejan en la Figura 2.1:

- **Combustión premezclada.** Se caracteriza por la presencia de una mezcla de combustible y oxidante ya preparada para iniciar la ignición. Una vez esta ocurre, la llama premezclada actúa como un sumidero de reactivos y una fuente de productos, de manera que el frente de llama tiende a propagarse hacia la mezcla fresca. Por tanto, la combustión premezclada se basa en la propagación de una onda de combustión, cuya velocidad característica permite distinguir dos regímenes: deflagraciones (llamas) y detonaciones. Mientras que las llamas son subsónicas y controladas, las detonaciones son supersónicas e incontroladas.
- **Combustión no-premezclada (o difusiva).** Es la llama característica en la mayoría de sistemas de propulsión, donde el combustible y el oxidante se encuentran separados inicialmente. Por ejemplo, un quemador con inyector coaxial dividido en una tobera central para el combustible y una tobera exterior para el oxidante da lugar a una llama difusiva. Otros buenos ejemplos de combustión no-premezclada son la llama de una vela y la combustión de una gota.

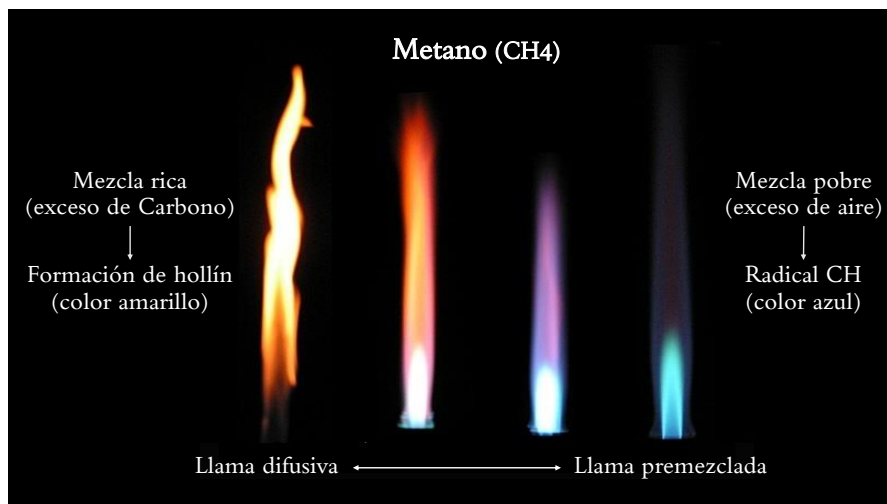


Figura 2.1: Introducción a la combustión - Evolución de la llama de un mechero Bunsen desde dosados ricos (llama difusiva) a dosados pobres (llama premezclada). Adaptada de [7].

2.2. Proceso de combustión de la materia sólida

La combustión de cualquier material sólido requiere de la vaporización de su materia en primer lugar, de manera que su forma gaseosa pueda combinarse con el aire circundante para formar la mezcla inflamable. Dicho proceso de mezclado está gobernado por los efectos difusivos, los cuales ocurren a una escala temporal mucho más lenta que la reacción química de combustión y, por tanto, acaban controlando también la velocidad a la que se consume el combustible. Es decir, **las llamas difusivas son las responsables de la combustión de un material sólido** [8].

El proceso de combustión de la materia sólida puede analizarse tanto desde la perspectiva microscópica (o molecular) como desde la perspectiva macroscópica (o física) [9].

2.2.1. Descripción microscópica

A nivel microscópico, la combustión de la materia sólida puede desglosarse en 3 etapas:

1. **Calentamiento.** La aplicación de una fuente de calor externa provoca el aumento de la temperatura de la sustancia, la cual puede ablandarse, fundirse o volatilizarse.
2. **Descomposición.** A altas temperaturas los enlaces moleculares se rompen, liberándose así diferentes sustancias gaseosas en función del material sólido. Este proceso puede acelerarse mediante la presencia de oxígeno en la superficie del sólido, lo que a su vez produciría otros gases como el monóxido de carbono CO y/o dióxido de carbono CO₂.
3. **Oxidación.** En presencia de oxígeno a elevadas temperaturas, las sustancias gaseosas reaccionan rápidamente, produciéndose la liberación de calor y la generación de los productos de la combustión (mayoritariamente, dióxido de carbono CO₂ y agua H₂O).

2.2.2. Descripción macroscópica

A escala macroscópica, la combustión de una masa sólida puede dividirse en 5 fases:

1. **Calentamiento.** La aplicación de una fuente de calor externa provoca el aumento de la temperatura de la materia sólida, cuya inercia térmica depende esencialmente de la conductividad térmica k , el calor específico C_p y la densidad ρ .
2. **Pirólisis.** El calor aplicado provoca la descomposición de la masa combustible, la cual finalmente se piroliza para convertirse a fase gaseosa.
3. **Ignición.** La masa combustible en estado gaseoso se acumula sobre la superficie del sólido. Una vez la concentración crítica de radicales libres se alcanza, el combustible gaseoso reacciona con el oxígeno. Cuando el calor generado por la oxidación del combustible es suficiente como para seguir pirolizando material combustible, la combustión se inicia con el consiguiente aumento de la velocidad de reacción y la producción de los productos (dióxido de carbono CO₂ y agua H₂O).
4. **Propagación de la llama.** A medida que el flujo de calor radiado por la llama aumenta, el material sólido adyacente se piroliza rápidamente, iniciándose una serie repetida de combustiones que resultan en el crecimiento del fuego.
5. **Desarrollo del fuego.** Conforme la llama crece, la cantidad de oxígeno circundante puede no ser suficiente y se generan productos incompletos de la combustión como monóxido de carbono CO y hollín, los cuales aumentan la componente radiante del flujo de calor.

Si bien esta descripción general es válida para gran parte de los materiales sólidos (e.g. polímeros, espumas o madera), es necesario profundizar en los conceptos clave de cada etapa.

1. Calentamiento

Como se ha comentado anteriormente, la velocidad a la que se calienta un material sólido es función de sus propiedades térmicas, de acuerdo con la forma diferencial de la **Ecuación de la Energía Térmica particularizada para materiales sólidos** (campo de velocidades nulo, i.e. $\vec{u} = 0$). De esta forma, en la Ecuación (2.2.1) se observa la presencia del **término transitorio**, dependiente de la densidad ρ (en kg/m³ según unidades SI) y calor específico C_p (en J/(kg·K) según unidades SI), del **término difusivo**, dependiente de la conductividad k (en W/(m·K) según unidades SI), y el **término fuente**, el cual representa la aplicación de una fuente de calor externa \dot{q}_{ext}''' (en W/m³ según unidades SI).

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T)) + \dot{q}_{ext}''' \quad (2.2.1)$$

Además, dicha ecuación debe acompañarse de las correspondientes condiciones de contorno para ser resuelta. Por ejemplo, una simplificación común es considerar los efectos difusivos como únicamente relevantes a lo largo del espesor del material sólido (dirección "z"), de manera que se desprecia su contribución sobre el plano del material (direcciones "x" - "y"). En tal caso, la Ecuación 2.2.1 puede estudiarse según dos enfoques diferentes: **Material térmicamente grueso** y **Material térmicamente delgado** [10].

Bajo la hipótesis de **material térmicamente grueso**, la ecuación unidimensional de la conducción se aplica para obtener el campo de temperaturas $T(z,t)$, donde $z = 0$ representa la superficie del material y $z = \delta$ se corresponde con la cara posterior del mismo (siendo δ el espesor del material). Su formulación se recoge en la Ecuación (2.2.2), donde se considera la cara posterior como adiabática ($\partial T / \partial z = 0$).

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) ; \quad -k \cdot \frac{\partial T(0,t)}{\partial z} = \dot{q}_c'' + \dot{q}_r'' - \dot{m}_p'' \cdot \Delta H_v ; \quad \frac{\partial T(\delta,t)}{\partial z} = 0 \quad (2.2.2)$$

donde:

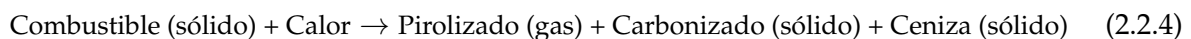
- \dot{q}_c'' y \dot{q}_r'' son los flujos convectivos y de radiación por unidad de área, respectivamente, expresados en W/m^2 según unidades SI.
- $\dot{m}_p'' \cdot \Delta H_v$ es el calor endotérmico debido a la pirólisis de la materia sólida de acuerdo al producto del flujo másico por unidad de área \dot{m}_p'' , en $kg/(s \cdot m^2)$ según unidades SI, y la energía de vaporización por unidad de masa ΔH_v , en J/kg según unidades SI.

Por su lado, para un **material térmicamente delgado** se asume que su temperatura es constante a lo largo de su espesor ($T \neq f(z)$), de manera que la condición de contorno superficial actúa directamente sobre el término transitorio. Es decir, el campo de temperaturas se obtiene según la Ecuación (2.2.3).

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \cdot \delta = \dot{q}_c'' + \dot{q}_r'' - \dot{m}_p'' \cdot \Delta H_v \quad (2.2.3)$$

2. Pirólisis

La pirólisis es un **proceso endotérmico**, en el cual el material sólido absorbe el calor aplicado sobre su superficie externa para descomponer su masa sólida en productos gaseosos (pirolizado) y sólidos (carbonizado y ceniza), de acuerdo con la Ecuación (2.2.4) [11].



Cabe apuntar que no todos los materiales sólidos son capaces de formar productos sólidos al pirolizarse, de forma que únicamente dan lugar a gas pirolizado.

El **ratio de masa pirolizada por unidad de área** \dot{m}_p'' está gobernado por la cinética de reacción del material sólido, de manera que sigue una **ecuación de tipo Arrhenius** como la mostrada en la Ecuación (2.2.5) [10].

$$\dot{m}_p'' = A \cdot \rho \cdot e^{-E_a/(R \cdot T)} \quad (2.2.5)$$

donde:

- A y E_a son el factor pre-exponencial, expresado en m/s según unidades SI, y la energía de activación, en J/mol según unidades SI.
- R es la constante universal de los gases ideales, en J/(mol·K) según unidades SI.

Los valores del factor pre-exponencial A y de la energía de activación E_a , los cuales constituyen los parámetros del modelo, son difíciles de determinar para cada material. Por ello, suelen derivarse a partir de la **temperatura de ignición**, que es la temperatura para la cual el proceso de ignición tiene lugar. Ello da lugar a una cinética de reacción como la recogida en la Figura 2.2, donde la curva marrón representa la zona en la que se piroliza el material (entorno a 300°C para este caso) y la curva azul es la evolución de la fracción másica a pirolizar.

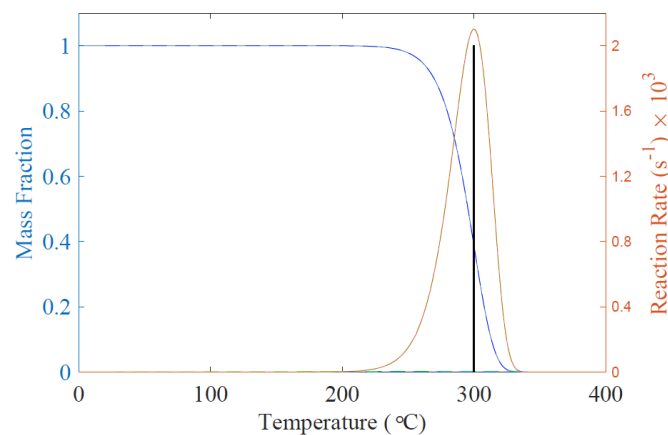
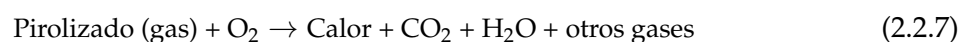
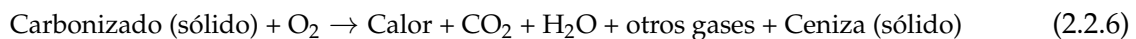


Figura 2.2: Proceso de combustión de la materia sólida - Cinética de reacción de la pirólisis [12].

Sin embargo, en la realidad **el ratio de la masa pirolizada está controlado por el balance de energía** recogido en el punto “1. Calentamiento”, de manera que la temperatura del material se mantiene aproximadamente constante durante este proceso. Es decir, el exceso de energía se invierte en seguir pirolizando materia sólida todavía fresca a la temperatura de pirólisis.

3. Ignición

La ignición es un **proceso exotérmico** en el que la oxidación de los productos de la pirólisis libera energía en forma de calor al ambiente circundante. Es decir, marca el punto de **inicio de la combustión**. En función del reactivo, la oxidación puede clasificarse en dos categorías: **combustión latente**, en la que el carbonizado sólido se deteriora, y **combustión con llama**, la cual consume el gas pirolizado; tal y como se describe en las Ecuaciones (2.2.6) y (2.2.7) [11].



Mientras que la combustión latente alcanza temperaturas máximas entre 450°C y 700°C con picos puntuales de 1000°C para combustibles con alto contenido energético (e.g. carbón), la combustión con llama ronda temperaturas cercanas a 1500°C. Además, en el primer caso el calor de combustión efectivo se ubica entorno a los 6-12 MJ/kg, mientras que para el segundo oscila alrededor de los 16-30 MJ/kg. Así mismo, la combustión latente puede iniciarse con mayor facilidad, siendo más difícil de extinguirse que la combustión con llama. Sin embargo, el ratio de propagación del fuego es mucho más veloz en esta última. También cabe apuntar que la combustión latente genera ceniza como producto, un residuo sólido con reactividad despreciable [11]. La Figura 2.3 muestra gráficamente ambos tipos de combustión.



Figura 2.3: Proceso de combustión de la materia sólida - Imágenes ilustrativas de: (a) combustión latente, y (b) combustión con llama [11].

Ambas combustiones están estrechamente relacionadas, de manera que una puede desembocar en la otra y viceversa, siendo de especial interés por su criticidad la **transición desde la combustión latente hacia la combustión con llama**. Esta se debe a la ignición espontánea del combustible en fase gaseosa a causa de la presencia de la combustión latente, la cual actúa como fuente del gas pirolizado producido en la Ecuación (2.2.4) y del calor necesario para iniciar la llama. Habitualmente, el frente del fuego se ubica en la profundidad del carbonizado sólido, donde se verifican las condiciones de flamabilidad de la mezcla pirolizada y el aporte de calor por parte de la combustión latente es suficiente [11].

En este punto, cabe remarcar que en multitud de artículos científicos se refiere a la ignición como el inicio de la combustión con llama [13]. Así mismo, también pueden darse dos formas de inicio de la combustión: **encendido provocado**, mediante la aplicación de una chispa o llama externa, y **auto-encendido**, en el que las condiciones de temperatura-presión de la zona inducen el inicio de la oxidación del combustible [14].

4. Propagación de la llama

La **propagación de la llama** es un concepto aplicable tanto a la combustión latente como a la combustión con llama, si bien en el primer caso se hablaría de **propagación del frente de fuego** hacia el carbonizado sólido “fresco” [11]. Este concepto queda fuera de los objetivos del presente Trabajo Final de Máster, el cual centra su interés en las situaciones más críticas en un incendio y, por tanto, son aquellas vinculadas a la combustión con llama.

La propagación de la llama es resultado de la consecución de los siguientes procesos [15]:

1. Vaporización del combustible sólido en gas pirolizable a causa del calor irradiado por la llama formada sobre su superficie.
2. Mezcla del gas pirolizado con el oxígeno presente en la zona cercana.
3. Combustión del gas pirolizado y formación de la llama difusiva.
4. Calentamiento del combustible sólido fresco hasta la temperatura de ignición.

Por ello, la velocidad de propagación queda determinada por el balance entre la energía emitida por la llama y la temperatura superficial. En este sentido, es fundamental determinar el **calor producido por la llama**, el cual puede obtenerse a partir de la Ecuación (2.2.8) [16] [17].

$$\dot{q}_f = \eta \cdot \dot{m}_f \cdot \Delta H_c = \dot{m}_f \cdot \Delta H_{ch} \quad (2.2.8)$$

donde:

- η es la eficiencia de la combustión, con valor unitario para combustión completa. Representa el ratio entre la energía efectiva liberada en la reacción química de combustión ΔH_{ch} y la energía total de combustión del combustible ΔH_c , ambas en J/kg según SI.
- \dot{m}_f es el ratio de masa combustible consumida (i.e. gas pirolizado), en kg/s según SI.

Dicho calor se transmite al entorno mediante los **flujos convectivos**, los cuales se mueven en el penacho formado encima de la llama, y los **flujos de radiación**, propagados en todas las direcciones [18] [19]. Dichas contribuciones se definen según la Ecuación (2.2.9), donde χ_r y χ_c se corresponden con las fracciones de calor emitidas por la llama según cada mecanismo.

$$\dot{q}_f = \dot{q}_{f,r} + \dot{q}_{f,c} = \chi_r \cdot \dot{q}_f + \chi_c \cdot \dot{q}_f \quad (2.2.9)$$

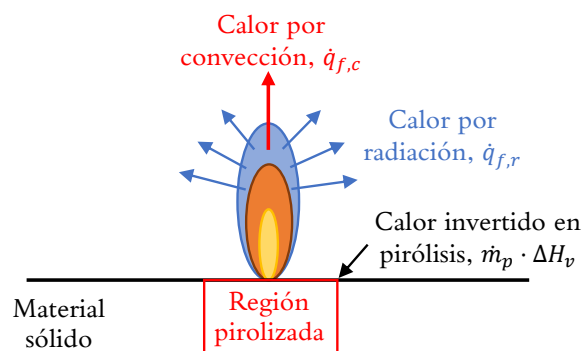


Figura 2.4: Proceso de la combustión de la materia sólida - Esquema ilustrativo de los flujos de calor involucrados en la combustión de una llama.

5. Desarrollo del fuego

Una vez el fuego se ha establecido, su naturaleza puede subdividirse en dos grupos: **combustiones libres** o con exceso de oxidante (exceso de aire) o **combustiones controladas por la ventilación** (exceso de combustible). En compartimentos cerrados, suele producirse la transición desde una combustión rica en oxígeno, donde las emisiones contaminantes son reducidas, hacia una combustión rica en combustible a medida que el fuego se propaga. En tal caso, la generación de productos incompletos de la combustión, como el monóxido de carbono (CO), aumenta drásticamente. [20].

2.3. Definición de la curva de carga de fuego

El diseño prestacional de sistemas de protección contra incendios requiere de la caracterización de la **curva de carga de fuego**, la cual se define como la **evolución temporal de la tasa de liberación de calor durante un eventual incendio del recinto de estudio**. En este sentido, este apartado se centra en la descripción de los métodos más extendidos para su obtención: **ensayos experimentales, modelos analíticos y métodos computacionales**.

2.3.1. Ensayos experimentales

Los **ensayos experimentales** se centran en el estudio de **incendios reales** en maquetas a escala 1:1 con tal de determinar las tasas de liberación de calor y especies. Pese a su exactitud, el número de ensayos de este tipo es reducido a causa del elevado coste que implican y el carácter destructivo de los mismos, ya que el recinto quemado queda inservible tras el fuego.

Dentro del sector ferroviario, los primeros estudios realizados se centraron en el análisis de los restos de incendios reales acontecidos durante la operación de diferentes vehículos. Sin embargo, la información recabada en dichos casos es mínima frente a la obtenida mediante la monitorización de un incendio en un ensayo a tamaño real. En esta línea, cabe destacar el proyecto EUREKA EU 499 "Fire in tunnels" (1990), llevado a cabo por 9 países europeos para estudiar diferentes vehículos en el interior de un túnel de una mina de 2,3 km de longitud en Noruega. En concreto, se ensayó un vagón de pasajeros, un vagón de metro, un camión con carga simulada y dos estructuras de madera [21]. Así mismo, otro estudio relevante es el *METRO Project* (2009-2012) liderado por el investigador Haukur Ingason [22].

Los ensayos a escala 1:1 reproducen un incendio bajo unas **condiciones determinadas**. Por ello, estos estudios suelen llevar asociados otros ensayos a escala reducida, así como modelos computacionales, con objeto de conseguir un modelo de menor coste económico y calibrado a partir de los datos experimentales. De esta manera, el **modelo calibrado**, bien a escala o computacional, permite obtener la **tasa de liberación de calor para diferentes escenarios**.

Un enfoque alternativo a los ensayos clásicos consiste en la **caracterización individual de los materiales** involucrados en el incendio mediante el Cono Calorimétrico (ISO 5660-1; ver Figura 2.5) o los análisis termo-gravimétricos TGA (*Thermo Gravimetric Analysis*). Estos estudios persiguen determinar la temperatura de ignición, las constantes de la cinética de la reacción química de combustión del modelo Arrhenius y las tasas de pirólisis, liberación de calor y de especies producto de la combustión del material ensayado. Estos parámetros son la base tanto de los modelos analíticos como de los métodos computacionales [23].

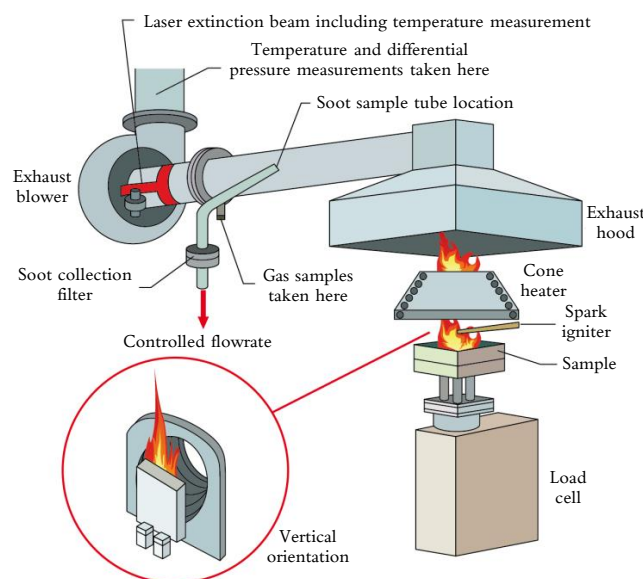


Figura 2.5: Ensayos experimentales - Esquema ilustrativo del Cono Calorimétrico [24].

2.3.2. Modelos analíticos

Los **modelos analíticos** proporcionan una primera estimación de la curva de carga de fuego a lo largo de un eventual incendio. En este sentido, multitud de modelos han sido desarrollados, cuya complejidad es diversa. Un **modelo básico** define los parámetros globales del incendio, es decir, la **tasa de liberación de calor promedio** (HRR_{mean} , del inglés *Heat Release Rate*) y la **energía total liberada** (E_{tot}); según la Ecuación (2.3.1) [25].

$$HRR_{mean} = \frac{\sum_i^n m_i \cdot \Delta H_{ch,i}}{t_{fire}} = \frac{E_{tot}}{t_{fire}} \quad (2.3.1)$$

donde:

- m_i es la masa de cada material involucrado en el incendio, en kg según unidades SI, y $\Delta H_{ch,i}$ es su energía de combustión efectiva, en J/kg según unidades SI.
- t_{fire} es el tiempo de incendio, expresado en s según SI.

Por otro lado, la tasa de liberación de calor promedio también puede estimarse a través de la Ecuación (2.3.2). El empleo de una u otra expresión depende de las propiedades obtenidas a partir de la caracterización de los materiales mediante ensayos experimentales (Cono Calorimétrico o TGA).

$$HRR_{mean} = \sum_i^n HRRPUA_{mean,i} \cdot A_i \quad (2.3.2)$$

donde:

- $HRRPUA_{mean,i}$ es la tasa de liberación de calor promedio de cada material por unidad de área (en inglés, *Heat Release Rate Per Unit Area*), expresada en W/m^2 según unidades SI, y A_i es el área expuesta al incendio de cada material involucrado en el escenario de fuego, definido m^2 según unidades SI.

Por tanto, este primer modelo analítico se basa en repartir de forma equitativa la energía total liberada en el incendio a lo largo de su duración. Sin embargo, la **caracterización completa** de un incendio requiere de la distinción de las siguientes **etapas** [23]:

1. **Fase incipiente.** Marca el inicio del fuego, que puede ser accidental o provocado, liberando una cantidad pequeña de potencia calorífica.
2. **Fase de crecimiento.** En esta fase la potencia liberada crece exponencialmente, de forma que la masa pirolizada aumenta y provoca la expansión del incendio.
3. **Incendio súbito generalizado o flashover.** En este punto, se produce la liberación máxima de potencia calorífica, dado que el incendio es generalizado.
4. **Incendio desarrollado.** Una vez el incendio ha alcanzado su extensión máxima, la potencia liberada se estabiliza y se mantiene constante mientras no exista déficit de mezcla "fresca".
5. **Fase de decaimiento.** A medida que se consume el combustible disponible, la potencia disipada empieza a disminuir hasta que el incendio se extingue.

Aplicado al sector ferroviario, Ingason et al. [26] introdujeron el **método exponencial** para la caracterización de un incendio, el cual proporciona una curva continua capaz de capturar el desarrollo completo del fuego con las etapas mencionadas anteriormente. La curva de carga de fuego propuesta por este método se define según la Ecuación (2.3.3).

$$\text{HRR}(t) = \text{HRR}_{max} \cdot n \cdot r \cdot \left(1 - e^{-k \cdot t}\right)^{n-1} \cdot e^{-k \cdot t} \quad (2.3.3)$$

donde:

- HRR_{max} es la tasa de liberación de calor máxima, es decir, aquella asociada a la fase de "incendio súbito generalizado". De acuerdo con la Ecuación (2.3.4), se expresa en W según unidades SI.

$$\text{HRR}_{max} = \sum_i^n \text{HRRPUA}_{max,i} \cdot A_i \quad (2.3.4)$$

- n es el índice de retardo (adimensional), k es el ancho de banda (en 1/s según unidades SI) y r es la amplitud de banda (adimensional); definidos en la Ecuación (2.3.5).

$$n \approx 0,74294 \cdot e^{(2,9 \cdot \text{HRR}_{max} \cdot t_{max} / E_{tot})} ; k = \frac{\ln(n)}{t_{max}} ; r = \left(1 - \frac{1}{n}\right)^{1-n} \quad (2.3.5)$$

De forma gráfica, la Figura 2.6 muestra el ajuste proporcionado por la curva exponencial frente a los datos experimentales obtenidos en el tercer ensayo del *METRO Project*, cuya tasa máxima de liberación de calor $\text{HRR}_{max} \approx 77 \text{ MW}$ se obtuvo para $t_{max} \approx 118 \text{ mins}$ con una energía total liberada $E_{tot} \approx 60 \text{ GJ}$.

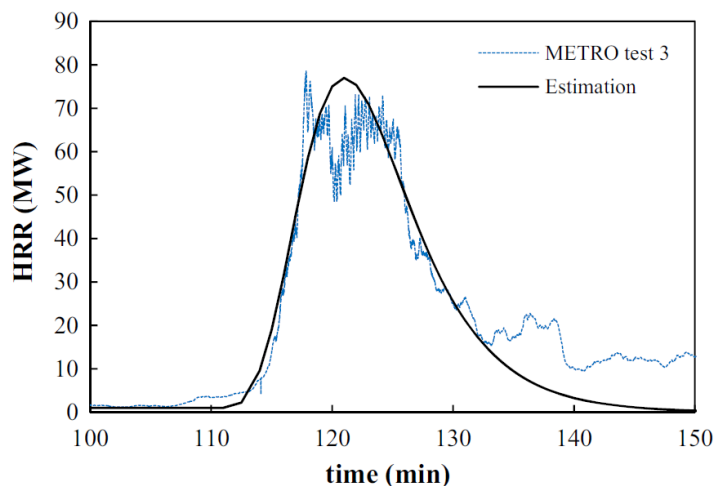


Figura 2.6: Modelos analíticos - Ajuste del método exponencial frente a los datos experimentales del tercer ensayo del *METRO Project* [26].

Así mismo, existen **curvas normativas** que definen la envolvente máxima admisible para la curva de carga de fuego de un vehículo ferroviario. A modo de ejemplo, en la Tabla 2.1 se presentan las ecuaciones límites proporcionadas por la normativa alemana sobre protección ante incendios "TRStrab Brandschutz" [27], las cuales se muestran gráficamente en la Figura 2.7. Cabe apuntar que la tasa de liberación de calor máxima depende de la longitud del vehículo "x". Además, para los cálculos iterativos (etapas 3, 5 y 6) se emplea un paso temporal de 60 s, mientras que la duración total del incendio es de 70 minutos (4200 s).

Etapa	Inicio/Fin	Modelo matemático	
#1) Fase incipiente	$t_0 = 0$ s	Función	$HRR(t) = \alpha_1 \cdot t^3$
	$t_f = 420$ s	α_1	$5,2 \cdot 10^{-5} \text{ kW/s}^3$
#2) Fase de crecimiento	$t_0 = 420$ s	Función	$HRR(t) = HRR(420 \text{ s}) + \alpha_2 \cdot (t - 360)^2$
	$t_f = 900$ s	α_2	$0,025 \text{ kW/s}^2$
#3) Incendio generalizado	$t_0 = 900$ s	Función	$HRR(t) = HRR' + 252 \cdot e^{0,004 \cdot t - 1,68}$
	$t_f = t(HRR_{max})$	HRR'	HRR paso cálculo previo
#4) Incendio desarrollado	$t_0 = t(HRR_{max})$	Función	$HRR(t) = HRR_{max} = 1387 \cdot x$
	$t_f = t_0 + 300$ s	x	Longitud vehículo
#5) Fase de decaimiento I	$t_0 = t(HRR_{max}) + 300$ s	Función	$HRR(t) = 0,94 \cdot HRR'$
	$t_f = t(HRR_{d,I})$	$HRR_{d,I}$	$0,78 \cdot HRR_{max}$
#6) Fase de decaimiento II	$t_0 = t(HRR_{d,I})$	Función	$HRR(t) = 0,9 \cdot HRR'$
	$t_f = 4200$ s		

Tabla 2.1: Modelos analíticos - Ecuaciones de la envolvente de la curva de carga de fuego según la normativa alemana "TRStrab Brandschutz" [27].

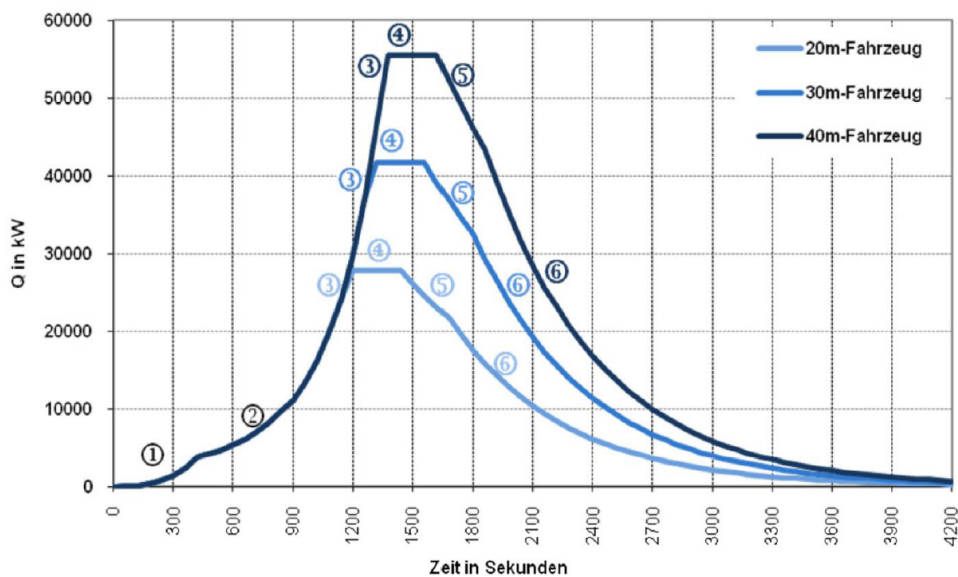


Figura 2.7: Modelos analíticos - Envolturas de la curva de carga de fuego en función de la longitud del vehículo ferroviario según la normativa alemana "TRStrab Brandschutz" [27].

2.3.3. Métodos computacionales

La implementación de **métodos computacionales** permite determinar las variables de campo (e.g. temperatura, presión, velocidad y concentración de especies) asociadas a la evolución del incendio. De esta manera, se contemplan dos aspectos: la **liberación de calor** y la **generación de especies** durante el incendio, cuyo comportamiento depende de las condiciones en las que se desarrolla el fuego (interior de un recinto o al aire libre).

El diseño de sistemas de protección contra incendios requiere de un modelo de este tipo para la verificación de las metas de diseño (e.g. posición y cantidad de aspersores y ubicación de las vías de evacuación en un vehículo ferroviario). Por ello, los **métodos computacionales** se han convertido en una parte fundamental dentro de la ingeniería de incendio, de forma que su uso es cada vez más extendido a causa de la creciente potencia de cálculo disponible. En este sentido, existen desde modelos de computación sencillos hasta modelos CFD completos, en los que se resuelven los fenómenos fluidodinámicos, así como las reacciones químicas de combustión de los reactivos involucrados en el escenario de fuego. Entre estos últimos destacan FireFOAM, solver integrado dentro del programa OpenFOAM[®] [28], y FDS[®], acrónimo de *Fire Dynamics Simulator* [19]. Dado que los tiempos de cálculo de estos últimos pueden llegar a ser muy elevados a causa del grado de complejidad y precisión con el que se resuelve la evolución del incendio, este Trabajo Final de Máster se centra en el desarrollo de un código CFD simplificado que permita obtener resultados fiables con un coste computacional moderado.

Capítulo 3

Metodología computacional

En este capítulo se introduce la metodología computacional utilizada para la caracterización de los mecanismos y fenómenos ligados a la combustión de un material sólido, especialmente enfocada a los problemas de incendios. En concreto, la Mecánica de Fluidos Computacional es la herramienta numérica seleccionada, detallándose el enfoque de cálculo empleado para la correcta modelización de la reacción química de una combustión, así como la disipación del calor generado por la llama. Por último, se presentan los programas numéricos empleados.

3.1. Fundamentos de la Mecánica de Fluidos Computacional

La **Mecánica de Fluidos Computacional**, conocida en inglés como *Computational Fluid Dynamics* (CFD), es una de las ramas derivadas del campo de la Mecánica de Fluidos gracias al crecimiento de las herramientas de supercomputación. En paralelo a los experimentos y las teorías matemáticas basadas en primeros principios, se ha convertido en la tercera rama del desarrollo científico e ingenieril [29]. Para ello, los programas CFD combinan diferentes métodos numéricos, así como algoritmos de resolución para obtener el detalle del campo asociado a los problemas de flujo de fluidos planteados. En este sentido, la Mecánica de Fluidos Computacional representa una de las últimas herramientas punteras englobadas dentro de los métodos CAE (*Computer Assisted Engineering*), entre los que destaca el Análisis de Elementos Finitos (FEA, del inglés *Finite Element Analysis*). Esta técnica, ya integrada en los procesos de diseño de la ingeniería en los años 1980s, permite el cálculo de sistemas mecánicos (movimiento de sólido rígido, vibraciones, etc). En contrapartida, la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes, cuya naturaleza implica una elevada complejidad, ha motivado el retraso en el desarrollo del CFD frente al FEA.

Entre los métodos de discretización empleados, el **Método de los Volúmenes Finitos** (FVM, del inglés *Finite Volume Method*) es el más extendido para los cálculos CFD. Se fundamenta en la discretización y transformación de las ecuaciones en derivadas parciales del problema en ecuaciones algebraicas, cuya resolución es más sencilla y económica computacionalmente. Para ello, de manera análoga a otros métodos como el Método de las Diferencias Finitas (FDM, *Finite Difference Method*) o el Método de los Elementos Finitos (FEM, *Finite Element Method*), la geometría del dominio se discretiza en elementos o celdas, donde las ecuaciones algebraicas se resuelven mediante integración numérica. Su principal ventaja reside en su carácter intrínsecamente conservativo, ya que algunos términos de las ecuaciones de conservación se transforman en flujos evaluados en las caras de las celdas, de manera que el flujo entrante a una celda o volumen finito es igual al saliente. Por su parte, las variables a analizar se calculan en los centroides de las celdas (su centro o vértices) y se interpolan al resto del elemento.

Además, la posibilidad de emplear mallas no estructuradas en geometrías complejas junto con la facilidad de implementación de multitud de condiciones de contorno han favorecido el predominio del FVM en multitud de aplicaciones relacionadas con el movimiento de fluidos y la transferencia de masa y energía. En este contexto, el Método de los Volúmenes Finitos es el enfoque empleado para la caracterización de los fenómenos físicos vinculados a la combustión de un material sólido en el presente Trabajo Final de Máster. Para profundizar en los aspectos numéricos del FVM (Método de los Volúmenes Finitos) puede recurrirse a la referencia [29], donde se exponen numerosos ejemplos de aplicación práctica.

A continuación, tras haber repasado el estado del arte de las técnicas de la Mecánica de Fluidos Computacional y sus aplicaciones, así como el contexto científico e ingenieril en el que se engloban, se introducen las principales etapas que constituyen toda simulación CFD.

3.1.1. Etapas de una simulación

El procedimiento a seguir en cualquier simulación CFD consta de tres etapas diferenciadas: pre-proceso, proceso o resolución y post-proceso. Atendiendo a las buenas prácticas comúnmente establecidas a partir de la experiencia de los ingenieros responsables de dicha área, el diagrama de flujos a seguir a lo largo de una simulación es el expuesto en la Figura 3.1.

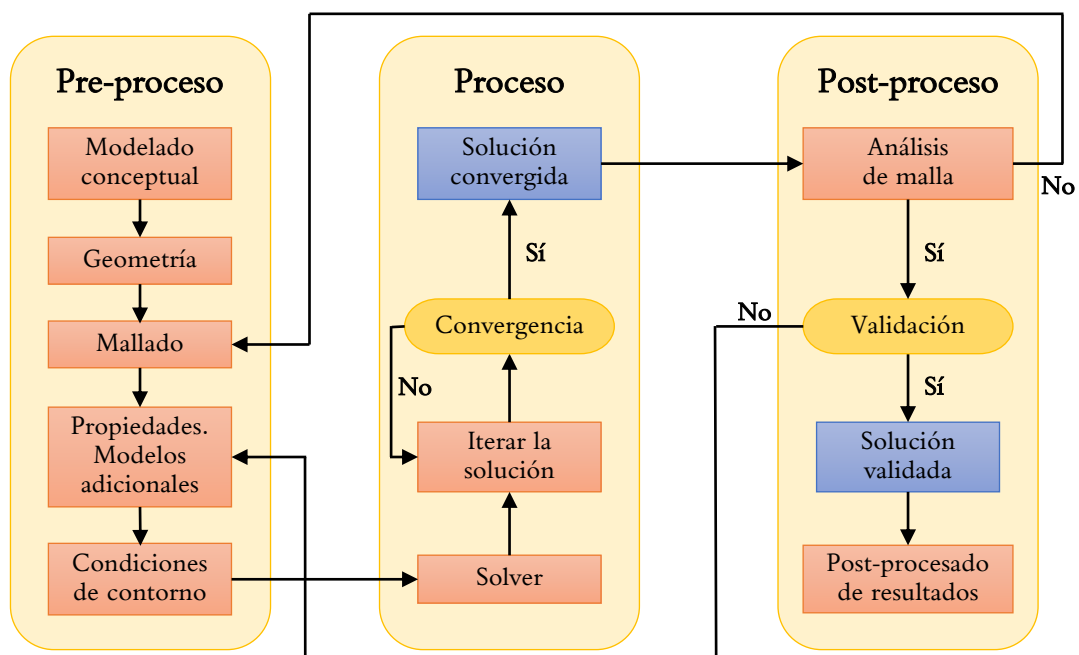


Figura 3.1: Fundamentos de la Mecánica de Fluidos Computacional - Etapas de una simulación CFD.

Pre-proceso. Esta etapa parte del **modelado conceptual**, mediante el cual se definen los objetivos de la simulación en términos de resultados y precisión, así como las posibles simplificaciones. En este sentido, cabría determinar si el flujo es bidimensional, axilsimétrico, tridimensional, periódico, estacionario o no estacionario, entre otros aspectos.

Tras ello, se procede al diseño de la **geometría** de acuerdo con las simplificaciones efectuadas en el paso anterior. Para ello, suele ser necesario el empleo de programas auxiliares de CAD (del inglés, *Computer-aided Design*) como CATIA®, SolidWorks®, NX® o AutoCAD®.

Sin embargo, algunos programas CFD cuentan con módulos CAD propios, tales como ANSYS DesignModeler® y SpaceClaim® en el paquete ANSYS®, agilizándose así el proceso de diseño. Cabe recordar que la geometría resultante conforma el posterior dominio de cálculo. Por ello, las fronteras donde se definirán las condiciones de contorno del problema deben ubicarse suficientemente lejos de la zona de interés.

Posteriormente, se lleva a cabo el **mallado** de la geometría, que consiste en la discretización del dominio de cálculo en celdas o volúmenes finitos. La malla determina la precisión de los resultados y la velocidad de cálculo, por lo que el mallado representa un compromiso entre la propia calidad de la malla y el coste computacional. Generalmente, una malla gruesa proporcionará una mayor velocidad de cálculo pero menor precisión que una malla más fina.

Atendiendo a las estrategias de mallado, la malla estructurada, no estructurada o híbrida son las opciones más empleadas. Por su lado, los elementos tetraédricos, hexaédricos y poliédricos son los más extendidos. Mención aparte merecen el uso de la malla trim, muy utilizada para cálculos de aerodinámica externa al igual que la malla overset; o la malla no conforme, empleada en simulaciones con malla móvil tales como el flujo de los aerogeneradores o turbomaquinaria [30]. Los programas CFD pueden contar con algoritmos de mallado integrados; si bien también existen programas *open-source* como SALOME®.

Además, en la etapa de pre-proceso se establecen las **condiciones de contorno** junto con los **modelos fluidodinámicos**: flujo compresible/incompresible, transferencia de calor a través de las paredes, gas ideal/real... A su vez, también se definen las **propiedades fluidodinámicas** como la densidad, viscosidad molecular o calor específico de los fluidos de estudio.

Un punto todavía por considerar es la selección del **modelo de turbulencia**, cuyos aspectos principales se detallan en el Anexo I.2 “*Modelado de la turbulencia*”, así como la elección de otros modelos adicionales, como el **modelo de combustión** para casos con flujo reactivo descrito en Sección 3.2 “*Planteamiento de problemas de flujo reactivos con combustión*”.

Proceso o resolución. Esta etapa está marcada por la **elección del “solver”**. Algunos de los aspectos a determinar son el número de núcleos de cálculo en paralelo, los esquemas de discretización y su orden, el número de Courant máximo, los factores de relajación y el método de resolución del acoplamiento presión-velocidad (i.e. acoplado, basado en densidad; o segregado, basado en presión). Tras ello, se lanza la simulación y la **solución** debe ser iterada hasta alcanzar la **convergencia del cálculo**. Para verificar esta condición, pueden establecerse algunos **criterios de convergencia** como la monitorización de los residuales de las ecuaciones de conservación o la tasa de variación de las variables de interés del problema.

Post-proceso. El primer paso del post-procesado consiste en el **análisis de la malla**, esencial para la determinación de una solución válida dentro de las restricciones impuestas por el modelado y potencia de cálculo disponible. Dicho estudio finaliza cuando entre dos mallas refinadas sucesivamente la solución “apenas”varía, por lo que el nivel de precisión puede ser impuesto por el usuario. Así, el usuario aceptará una mayor desviación en diseños preliminares donde prevalece la contención en el coste computacional, y exigirá más precisión en diseños avanzados en los que prima el bajo error numérico de discretización. Tras ello, la solución obtenida debe **validarse** a partir de comparaciones con simulaciones ya validadas o datos experimentales fiables que provengan de casos de estudio con configuración idéntica o lo suficientemente cercana como para tratar los mismos fenómenos físicos.

Si no es posible validar la solución por falta de datos en la literatura ya existente, es recomendable revisar el modelado y la selección del modelo de turbulencia u otros modelos adicionales, ya que en la mayoría de casos las principales desviaciones son provocadas por una elección errónea en alguna de estas fases. Finalmente, si la solución queda validada, se pasa a la **presentación, análisis y exposición de los resultados** obtenidos. Para ello, puede recurrirse a la extracción de los valores numéricos de las variables de interés, distribuciones de las mismas a lo largo de una sección, creación de escenas de geometría, malla, contornos de campos escalares, vectores o líneas de corriente, etc.

Respecto a las herramientas de post-procesado, existen programas integrados en el propio *solver* CFD, como el módulo de post-proceso dedicado en ANSYS Fluent[®] o Star-CCM+[®]. Si bien sus capacidades son limitadas, su principal ventaja frente a los programas externos es la comodidad. Estos últimos permiten llevar a cabo un post-proceso independiente del *solver*, aunque requieren importar la solución. Destacan ParaView[®] o Tecplot[®]. Además, entornos matemáticos como Matlab[®] sirven para analizar contornos 2D, gráficas XY o valores globales.

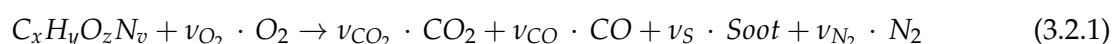
Para cerrar este apartado, cabe introducir algunos de los **programas CFD** disponibles en el mercado, aunque algunos de ellos ya han sido mencionados. Se clasifican en dos categorías:

- Software comerciales. Son paquetes de pago con códigos pulidos y libres de defectos de sistema, entre los que se pueden distinguir ANSYS Fluent[®] o Star-CCM+[®].
- Software *open-source* o libres. Son paquetes gratuitos que se van mejorando con los reportes de la misma comunidad que hace uso de ellos. Entre ellos, destaca OpenFOAM[®], programa ampliamente empleado en líneas de investigación por su versatilidad. En el caso del presente Trabajo Final de Máster, se hace uso del programa FDS[®] (*Fire Dynamics Simulator*) para validar el código CFD desarrollado en Python[®].

3.2. Planteamiento de problemas de flujos reactivos con combustión

A la hora de modelar los flujos reactivos con combustión existen dos alternativas principales: por un lado, la reacción del combustible con el oxígeno circundante es infinitamente rápida y por tanto únicamente está controlada por la mezcla (**combustión controlada por la mezcla** o *mixing-controlled*), o por otro lado, la reacción es más lenta (**combustiones de ratio-finito** o *finite-rate*). Habitualmente los tiempos de reacción son mucho menores que los tiempos característicos de la fluidodinámica (conducción, convección, transitorios térmicos, etc), de manera que el enfoque predominante en el modelado de flujos reactivos es la **combustión controlada por la mezcla** [12].

En tal caso, frecuentemente la combustión se resuelve mediante un **modelo de reacción química de un único paso** o *single-step chemistry*, donde la reacción de combustión se describe según la Ecuación (3.2.1).



donde:

- $C_xH_yO_zN_v$ es el combustible de tipo hidrocarburo, O_2 es el oxígeno, CO_2 es el dióxido de carbono, CO es el monóxido de carbono, "Soot" es el hollín o partículas de material combustible liberadas y N_2 es el nitrógeno.

- v_i son los coeficientes estequiométricos de cada especie "i".

A **nivel energético**, durante la reacción química de combustión se libera la energía de combustión asociada a la masa de combustible quemada, tal y como se especifica en la Ecuación (2.2.8). Dicha energía se transmite a los alrededores en forma de flujos convectivos y flujos radiativos según la Ecuación (2.2.9).

Cabe apuntar que el programa FDS[®] emplea el modelado descrito (reacción química de un único paso con combustión controlada por la mezcla) [12]. Así mismo, el modelo CFD desarrollado a lo largo del presente Trabajo Final de Máster emplea este mismo enfoque para el tratamiento de la combustión del material sólido tras ser pirolizado, de forma que la ignición es inmediatamente posterior a la pirólisis.

3.3. Herramientas computacionales

A continuación se describen el conjunto de herramientas computacionales empleadas para llevar a cabo el estudio CFD de la física asociada a la combustión de la materia sólida. A tal efecto, se presenta el lenguaje de programación empleado para el desarrollo del código CFD simplificado (Python[®]). Así mismo, se exponen los programas empleados para configurar y lanzar las simulaciones que sirven para validar el código desarrollado (ANSYS Fluent[®] y FDS[®]), así como para analizar y post-procesar los resultados obtenidos (SmokeView[®]).

3.3.1. Python[®]

Python[®] es un **lenguaje de alto nivel de programación interpretado** cuya filosofía hace hincapié en la legibilidad de su código. Es decir, la traducción del programa al código del sistema se lleva a cabo instrucción por instrucción, sin necesidad de compilar previamente el código. Además, se trata de un lenguaje de programación **multiparadigma**, dado que soporta parcialmente la programación orientada a objetos (como Java[®] o C++[®]) y la programación funcional. Una de sus principales ventajas reside en su facilidad de aprendizaje, así como su amplia popularidad al tratarse de un **código abierto** [31]. Por ello, a pesar de ser más lento que un código compilado para aplicaciones grandes, se opta por emplear Python[®] para el presente Trabajo Final de Máster.

En concreto, se usa la versión *Python 3.7* con el entorno de desarrollo *Spyder 4.0.1*, de manera que el código se estructura en funciones que son posteriormente llamadas por un *script* máster o lanzador; tal y como se muestra en el Capítulo 4 "*Desarrollo del código CFD*".

3.3.2. ANSYS Fluent[®]

ANSYS Fluent[®] es un **programa CFD comercial** empleado ampliamente en la industria para la resolución de multitud de problemas de flujos de fluidos en los que se involucran fenómenos como la transmisión de calor, la fluidodinámica, las reacciones químicas o las interacciones entre flujos multifásicos. En particular, a lo largo de este Trabajo Final de Máster se hace uso de su licencia estudiantil, limitada a mallas con menos de 512000 celdas, para el estudio de la conducción pura en una placa (ver Sección 5.2 "*Modelo #1 - Pirólisis*").

3.3.3. FDS[®]

FDS[®], acrónimo de *Fire Dynamics Simulator*, es un **programa CFD libre** u *open-source* específico para el estudio del **flujo de fluidos gobernados por un fuego**. En particular, se encarga de resolver numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes simplificadas para flujo incompresible ($Ma < 0,3$) y forzado térmicamente con especial énfasis en el tratamiento de los mecanismos de transporte del calor emitido por una llama [32].

Sus **principales hipótesis** de modelado se listan a continuación [12]:

- **Hidrodinámica.** Como se ha comentado, FDS[®] resuelve numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo incompresible dominado por las cargas térmicas derivadas de un incendio. Para ello, emplea un esquema predictor-corrector explícito con discretización de segundo orden en espacio y tiempo.
- **Turbulencia.** Para una resolución óptima de los mecanismos físicos implicados en un incendio, la turbulencia se resuelve mediante el enfoque LES (opción por defecto) o DNS.
- **Combustión.** Se introduce la formulación de reacción química controlada por la mezcla en un único paso (*single-step, mixing-controlled chemical reaction*). Las especies consideradas son combustible y aire, las cuales dan lugar a los productos de la combustión.
- **Radiación.** Se resuelve una ecuación adicional para el transporte de la radiación, la cual tiene en cuenta 100 ángulos discretos.

FDS[®] no cuenta con interfaz gráfica de usuario o GUI (del inglés, *Graphical User Interface*), por lo que los archivos de la simulación se generan mediante algún editor de texto con extensión `.fds` y se lanzan a través de la **terminal de comandos de FDS**, denominada `CMDfds.exe`. Los archivos de la simulación se estructuran en bloques encabezados por **instrucciones** o *namelist* registrados, los cuales van acompañados de la definición de los parámetros de la simulación. A modo de ejemplo, `&COMB` es el comando empleado para definir los mecanismos de la combustión (modelo de extinción, fracción de calor emitido mediante radiación, etc). Así mismo la instrucción `&DEVC` define los datos numéricos de salida en formato `.csv`, mientras que los comandos `&BNDF` y `&SLCF` indican las variables a considerar en el análisis en SmokeView[®].

3.3.4. SmokeView[®]

SmokeView[®] es la **herramienta de visualización** dedicada para el tratamiento de los datos de salida de la simulaciones de FDS[®] [32]. Cuenta con una interfaz gráfica que permite analizar la evolución temporal de las variables de interés definidas en el archivo de entrada de FDS[®], tales como el campo de temperaturas, la tasa de liberación de calor por unidad de área HRRPUA (*Heat Release Rate Per Unit Area*) o la masa de combustible consumido.

Capítulo 4

Desarrollo del código CFD

4.1. Planteamiento del problema

El código CFD desarrollado plantea la resolución de la **Ecuación de conservación de la Energía Térmica** en un material sólido según la Ecuación (4.1.1), compuesta por el término temporal, difusivo y fuente. Este último agrupa las contribuciones de la radiación emitida por la llama, siendo una fracción absorbida por el sólido, así como los efectos convectivos del aire del habitáculo, cuya temperatura aumenta con el desarrollo del incendio, y la energía invertida en pirolizar el sólido (ver Figura 4.1).

$$\underbrace{\rho \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt}}_{\text{Temporal}} = \underbrace{\vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T))}_{\text{Difusivo}} + \underbrace{\dot{q}_s'''}_{\text{Fuente}} \quad (4.1.1)$$

La aplicación de la Ecuación (4.1.1) se restringe a un plano en el que se extiende la masa sólida conformando el suelo de un habitáculo. Con tal de reducir el coste computacional, se opta por la formulación del **material térmicamente delgado**, de manera que el espesor de dicho suelo es una única celda con temperatura constante (ver Subsección 2.2.2 “*Descripción macroscópica*”). Por ello, se configura un **dominio computacional bidimensional**. Por su parte, el **grado de complejidad en el modelado del término fuente \dot{q}_s'''** determina los diferentes **modelos de incendio 2D** desarrollados a lo largo de este proyecto.

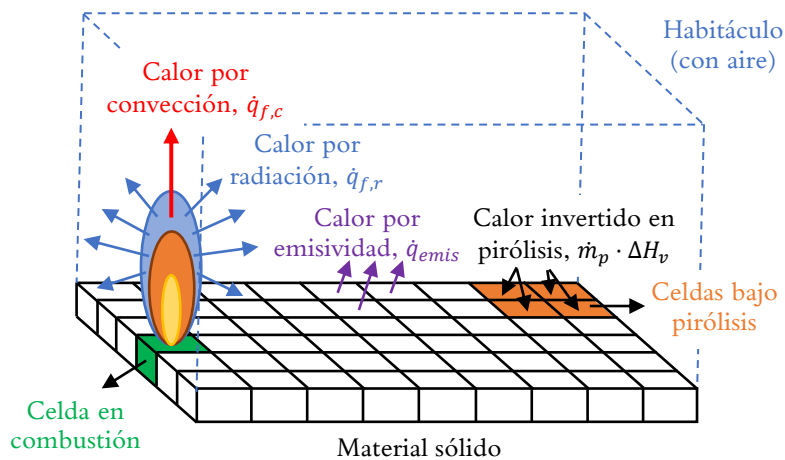


Figura 4.1: Planteamiento del problema - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el modelo CFD acerca de la combustión de un material sólido.

4.2. Descripción del método

Para resolver la Ecuación de conservación de la Energía Térmica se emplea el **Método de los Volúmenes Finitos**, cuya integración sobre el volumen de control desemboca en la Ecuación (4.2.1), la cual posteriormente es evaluada en cada una de las celdas del volumen de control para dar lugar a la Ecuación (4.2.2).

$$\int \int \int_V \rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \cdot dV = \int \int_A (k \cdot \vec{\nabla}(T)) \cdot \vec{n} \cdot dA + \int \int \int_V \dot{q}_s''' \cdot dV \quad (4.2.1)$$

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \cdot V_i = (k \cdot \vec{\nabla}(T))_{i,j} \cdot \vec{n}_{i,j} \cdot A_{i,j} + \dot{q}_{s,i}''' \cdot V_i \quad (4.2.2)$$

donde “i” hace referencia a la celda de estudio, mientras que “j” son las caras de la celda.

Para evaluar la Ecuación (4.2.2), se deben aproximar la derivada temporal y los flujos difusivos, así como determinarse las contribuciones del término fuente. En última instancia, se resolverá un sistema matricial algebraico del tipo $\underline{A} \cdot \vec{T} = \vec{b}$. Por ello, el código CFD se estructura hasta llegar a tal punto.

4.2.1. Mallado

En primer lugar, se lleva a cabo el mallado de la geometría de estudio. Tal y como se ha comentado anteriormente, se trata de una geometría con forma de cuadrilátero (2D), por lo que se opta por el empleo de **celdas rectangulares**. La generación del mallado se realiza mediante las siguientes funciones:

- `mallado.mesh_generation`. Calcula la matriz de **celdas** y **nodos** del dominio rectangular. La matriz de celdas, con dimensiones (n x 4), contiene la numeración de los nodos que forman cada celda, donde “n” es el número total de celdas. Por su parte, la matriz de nodos, con dimensiones (m x 2), contiene las coordenadas espaciales de cada nodo, siendo “m” el número total de nodos.
- `mallado.BCs_cond`. Define las **condiciones de contorno** en las fronteras del dominio computacional.
- `mallado.mesh_properties`. Computa las propiedades de la malla, tales como la posición de los **centroides**, **volumen** de cada celda, **área** de las caras, **vectores normales** a cada cara y **conectividad** entre celdas.

4.2.2. Discretización espacial de los flujos conductivos

El término difusivo representa la cantidad de calor intercambiado a causa de la diferencia de temperatura entre dos puntos espaciados dentro de una misma materia, siendo la conductividad térmica, k, la propiedad física que determina la capacidad de conducción del material.

La conducción es un mecanismo de transporte difusivo, por lo que no existe una dirección preferente en la que se traslade la información. Por ello, suelen emplearse las **diferencias finitas centradas** para la obtención de los flujos conductivos, de manera que la elección del esquema de discretización es coherente con la física del problema a resolver. Según el esquema *Central Differencing Scheme* (CDS), los flujos difusivos se aproximan tal y como indica la Ecuación (4.2.3) con notación de Einstein.

$$(k \cdot \vec{\nabla}(T))_{i,j} \cdot \vec{n}_{i,j} \cdot A_{i,j} \approx k \cdot \frac{T_i - T_k}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|^2} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_k) \cdot \vec{n}_{i,j} \cdot A_{i,j} \quad (4.2.3)$$

donde “k” hace referencia a la celda vecina a la celda “i”, con la que comparte la cara “j”.

Cabe apuntar que el **esquema CDS es un método de segundo orden** si y solo si los flujos son perpendiculares a las caras de las celdas, es decir, el radiovector $(\vec{r}_i - \vec{r}_k)$ es paralelo a $\vec{n}_{i,j}$; tal y como ocurre para el mallado cartesiano implementado en este proyecto. Dicho esquema se implementa en la función `solver.cond_CDS`.

Finalmente, tras aplicar la discretización espacial tanto a los flujos difusivos como al término fuente, cuyo modelado se detalla en la Sección 4.3 “*Modelos de incendio*”, se obtiene un sistema del tipo $\vec{T}' = \underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}'$, el cual debe integrarse temporalmente para obtener la solución del vector de estado \vec{T} . El ensamblaje de dicho sistema se lleva a cabo mediante la función `solver.EnergyEq`.

4.2.3. Integrador temporal

Para obtener la solución del problema a lo largo del tiempo, este debe discretizarse temporalmente. Intuitivamente, podría hacerse según la Ecuación (4.2.4).

$$\dot{T} = \frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T(t_0 + \Delta t) - T(t_0)}{\Delta t} \rightarrow T(t_0 + \Delta t) = T(t_0) + \Delta t \cdot \dot{T} \quad (4.2.4)$$

donde Δt representa el paso temporal y t_0 es el tiempo anterior.

Los integradores temporales, desarrollados empleando la aproximación de la Ecuación (4.2.4) como base, pueden ser de dos tipos: **métodos explícitos** y **métodos implícitos**.

Métodos explícitos

La principal ventaja de los métodos explícitos radica en la **resolución directa del sistema matricial**, dado que consisten en propagar la solución en el tiempo. A modo de ejemplo, la Ecuación (4.2.5) muestra el **método Runge-Kutta de primer orden**, también conocido como el **método de Euler explícito**, el cual evalúa la derivada temporal en el tiempo anterior.

$$\vec{T}' = \left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}' \right]_{t_0} \rightarrow \boxed{\vec{T}(t_0 + \Delta t) = \vec{T}(t_0) + \Delta t \cdot \left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}' \right]_{t_0}} \quad (4.2.5)$$

Sin embargo, la estabilidad de estos métodos depende de los autovalores (s) de la matriz $(\underline{\underline{I}} + \Delta t \cdot \underline{\underline{A}}')$, por lo que el paso temporal está limitado por la condición $\max(|s|) < 1$. Sin embargo, este cálculo es costoso e iterativo para encontrar el salto temporal máximo Δt_{max} y suelen emplearse condiciones de estabilidad aproximadas, que son necesarias pero no suficientes. Uno de estos números es el **ratio paso temporal-tiempo característico de difusión (d)**, el cual se expresa según la Ecuación (4.2.6).

$$d = \frac{k \cdot \Delta t}{\rho \cdot C_p \cdot (\Delta x)^2} < 0,5 \rightarrow \Delta t < \frac{\rho \cdot C_p \cdot (\Delta x)^2}{2 \cdot k} \quad (4.2.6)$$

donde Δx es el tamaño característico (mínimo) de la malla.

Métodos implícitos

Por su parte, los métodos implícitos son **incondicionalmente estables**, lo cual significa que el paso temporal Δt no está limitado por la estabilidad numérica del cálculo. Uno de los métodos implícitos más extendido es el **metodo de Euler implícito**, el cual evalúa la función derivada en el paso temporal a calcular ($t_0 + \Delta t$); tal y como recoge la Ecuación (4.2.7).

$$\vec{T} = \left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}' \right]_{t_0 + \Delta t} \rightarrow \boxed{\vec{T}(t_0 + \Delta t) = \vec{T}(t_0) + \Delta t \cdot \left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}' \right]_{t_0 + \Delta t}} \quad (4.2.7)$$

Por tanto,

$$\underbrace{\left(\underline{\underline{I}} - \Delta t \cdot \left[\underline{\underline{A}}' \right]_{t_0 + \Delta t} \right)}_{\underline{\underline{A}}} \cdot \vec{T}(t_0 + \Delta t) = \vec{T}(t_0) + \Delta t \cdot \underbrace{\left[\vec{b}' \right]_{t_0 + \Delta t}}_{\vec{b}} \quad (4.2.8)$$

El método de Euler implícito es un método de **primer orden**, de manera que el error de discretización es proporcional a Δt . Sin embargo el **método de Crank-Nicolson**, el cual se encuentra a caballo entre el método de Euler explícito e implícito, conforma un **método implícito de segundo orden** (error de discretización proporcional a Δt^2). Su expresión se recoge en la Ecuación (4.2.9).

$$\vec{T} = \frac{\left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}' \right]_{t_0} + \left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}' \right]_{t_0 + \Delta t}}{2} \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{T}(t_0 + \Delta t) = \vec{T}(t_0) + \frac{\Delta t}{2} \cdot \left(\left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}' \right]_{t_0} + \left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} + \vec{b}' \right]_{t_0 + \Delta t} \right)} \quad (4.2.9)$$

Es decir,

$$\underbrace{\left(\underline{\underline{I}} - \frac{\Delta t}{2} \cdot \left[\underline{\underline{A}}' \right]_{t_0 + \Delta t} \right)}_{\underline{\underline{A}}} \cdot \vec{T}(t_0 + \Delta t) = \vec{T}(t_0) + \frac{\Delta t}{2} \cdot \underbrace{\left(\left[\vec{b}' \right]_{t_0} + \left[\vec{b}' \right]_{t_0 + \Delta t} + \left[\underline{\underline{A}}' \cdot \vec{T} \right]_{t_0} \right)}_{\vec{b}} \quad (4.2.10)$$

En particular, en este proyecto Trabajo Final de Máster se implementa el método de Crank-Nicolson en la función `solver.CrankNich`, ya que los métodos implícitos permiten emplear pasos temporales más grandes que los métodos explícitos. De esta forma, la condición estacionaria puede alcanzarse en un menor número de iteraciones. Pese a ello, si desea capturarse correctamente la evolución transitoria del caso de estudio, no deben tomarse tamaños temporales excesivamente grandes. En este sentido, el **paso temporal** se define a través de la función `solver.dt_timeStep_EnergyEq`, la cual permite asignar un valor constante o función de la condición de estabilidad del número difusivo “d”, anteriormente definido en la Ecuación (4.2.6).

4.2.4. Resolución del sistema matricial lineal

Tal y como puede observarse en las Ecuaciones (4.2.8) y (4.2.10), los métodos implícitos implican la inversión de la matriz $\underline{\underline{A}}$ para la resolución del sistema matricial lineal $\underline{\underline{A}} \cdot \vec{T} = \vec{b}$, lo cual acarrea un coste muy elevado si el número de celdas no es reducido. Por ello, suele recurrirse a **métodos iterativos**, implementándose en este proyecto el método GMRES (*Generalized Minimal Residual Method*) a través de la función `solver.solver_iterative_GMRES`.

4.2.5. Criterios de convergencia

Los criterios de convergencia determinan el final de la simulación. Estos se implementan en la función `solver.stopCriteria` y son los siguientes:

- Número máximo de iteraciones.
- Residuales.

Además, se establece un parámetro de protección para detectar si la solución ha divergido y, en consecuencia, el campo de temperaturas se ha disparado.

4.2.6. Guardado de los datos de la simulación

La función `solver.saveData` se encarga de almacenar la solución del campo de temperaturas de acuerdo con la frecuencia de muestreo definida como valor de entrada. Así mismo, la función `solver.exportData` permite exportar dichos datos en un fichero de texto con extensión `.txt`.

4.2.7. Aplicación del algoritmo de resolución

El algoritmo de resolución implica la **ejecución secuencial** de las funciones mencionadas en los apartados previos. Por tanto, en primer lugar se calculan los flujos conductivos y las contribuciones del término fuente, para posteriormente ensamblar el sistema matricial con dependencia temporal. Tras ello, se determina el paso temporal y se aplica el integrador temporal de Crank-Nicolson para obtener la nueva solución del campo de temperaturas a través de la resolución iterativa del sistema matricial lineal mediante el método GMRES. Por último, se verifican los criterios de convergencia y se guardan aquellos datos de interés para el post-proceso. Estos pasos se agrupan en la función `solver.solver_EnergyEq`.

4.2.8. Post-proceso de la solución

Para analizar la solución se implementan las siguientes funciones de post-proceso:

- `post.plot_mesh`. Proporciona una imagen de la malla con sus celdas y centroides.
- `post.plot_contourField`. Calcula el contorno del campo de temperaturas.

4.3. Modelos de incendio

4.3.1. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante

El **modelo #0** resuelve el **comportamiento térmico transitorio del material sólido sometido a los efectos de la conducción y la aplicación de una fuente de calor externa, cuyo valor es constante e invariable a lo largo del tiempo**. En este sentido, el término fuente \dot{q}_s''' de la Ecuación de conservación de la Energía Térmica (ver Ecuación (4.1.1)) únicamente cuenta con la contribución mencionada, cuya discretización espacial se lleva a cabo en la función `solver.q_ext`. Dicha función se encarga de distribuir el calor externo aplicado de forma uniforme entre las celdas que conforman el dominio computacional.

El flujo de trabajo de las funciones que conforman el modelo #0 se resume en la Figura 4.2, mientras que su planteamiento se muestra de forma esquemática en la Figura 4.3. La validación de dicho modelo se lleva a cabo en la Sección 5.2 “Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante”.

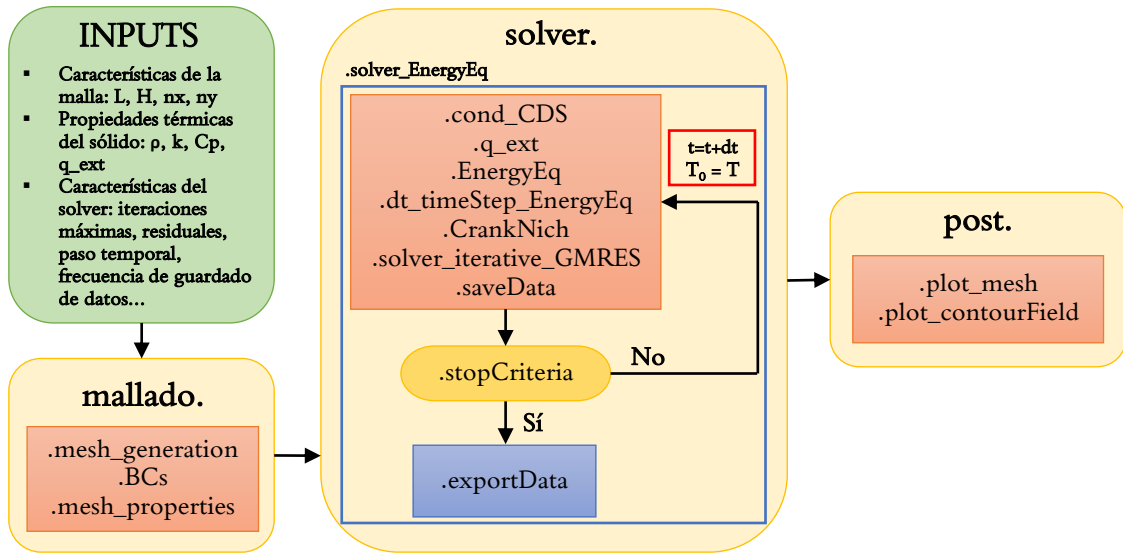


Figura 4.2: Modelos de incendio - Esquema de las funciones implementadas para el Modelo #0.

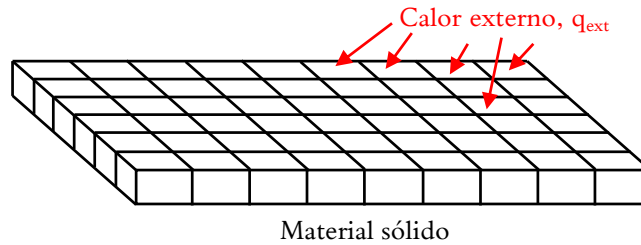


Figura 4.3: Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el Modelo #0.

4.3.2. Modelo #1 - Pirólisis

El modelo #1 resuelve el comportamiento térmico transitorio del material sólido sometido a los efectos de la conducción, la pirólisis y la aplicación de una fuente de calor externa, cuyo valor es constante e invariable a lo largo del tiempo. En este sentido, el término fuente \dot{q}_s''' de la Ecuación de conservación de la Energía Térmica (ver Ecuación (4.1.1)), cuenta con la contribución de la fuente de calor externo y del sumidero representado por el calor invertido en pirolizar la materia sólida. Debido a la presencia de las dos contribuciones mencionadas, este modelo se estructura en dos partes o fases:

1. **Calentamiento de la materia sólida.** Durante esta etapa, el comportamiento térmico de la materia está gobernado por la **Ecuación de conservación de la Energía Térmica**. En ella, se incluyen los términos transitorio, difusivo y fuente, donde este último únicamente cuenta con la contribución de la fuente de calor externa aplicada. La incógnita a resolver bajo este régimen es la **temperatura de la celda** de la Ecuación (4.3.1).

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T)) + \dot{q}_{ext}''' \rightarrow \boxed{T = \text{incógnita}} \quad (4.3.1)$$

2. **Pirólisis.** Una vez se alcanza la temperatura de pirólisis, el comportamiento térmico queda definido por la **Ecuación de la Pirólisis**, de manera que el cambio de "fase" de la materia sólida tiene lugar a temperatura constante y la incógnita a resolver es el **flujo de masa pirolizada** de la Ecuación (4.3.2).

$$0 = \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T)) + \dot{q}_{ext}''' - \dot{m}_p''' \cdot \Delta H_v \rightarrow \dot{m}_p''' = \text{incógnita} \quad (4.3.2)$$

Por tanto, el modelo #1 se encarga de resolver dos problemas acoplados: calentamiento según la Ecuación de conservación de la Energía Térmica y pirólisis según la Ecuación de la Pirólisis, donde la temperatura de la celda determina si debe resolver uno u otro. Por ello, el código añade y/o modifica las siguientes funciones con respecto al modelo base:

- `solver.q_ext`. Se encarga de la discretización espacial de la fuente de calor aplicada uniformemente a todo el dominio.
- `solver.q_ext_cell`. Determina la discretización espacial de la fuente de calor aplicada uniformemente a determinadas celdas del dominio.
- `solver.EnergyEq`. Ensambla el sistema asociado a la Ecuación de conservación de la Ecuación de la Energía Térmica tras su discretización espacial (considerando los términos fuente).
- `solver.pyrolysis_status`. Define el estado de la celda según la temperatura obtenida en el último paso de cálculo, es decir, determina si la celda está sometida a pirólisis o no.
- `solver.q_pyrolysis`. Discretiza espacialmente la Ecuación de la Pirólisis, obteniendo la matriz del sistema \underline{A}_{pyr} .
- `solver.PyrEq`. Ensambla el sistema lineal de la Ecuación de la Pirólisis según $\underline{A}_{pyr} \cdot \vec{m}_p = \vec{b}_{pyr}$.
- `solver.assemble_systemEqs`. Acopla los sistemas lineales de la Ecuación de conservación de la Energía Térmica y de la Ecuación de la Pirólisis según el estado de la celda (sujeta a calentamiento o pirólisis). Además, añade los términos cruzados provenientes de los flujos conductivos. De esta manera, se obtiene el sistema matricial lineal $\underline{A} \cdot \vec{w} = \vec{b}$, donde \vec{w} es el vector de incógnitas (temperatura T_i en las celdas que se están calentando y flujo de masa pirolizada $\dot{m}_{p,i}$ en las celdas bajo pirólisis).
- `solver.solution_split`. Esta función obtiene los vectores de temperatura \vec{T} y masa pirolizada \vec{m}_p a partir del vector solución \vec{w} .
- `solver.mass_budget`. Actualiza la cantidad de materia sólida restante en cada celda por pirolizar, así como la cantidad de combustible ya pirolizado.
- `solver.saveData`. Se modifica dicha función para que también guarde la cantidad de masa por pirolizar y ya pirolizada en todo el dominio.
- `solver.exportData`. Se modifica esta función para que también exporte el flujo de masa pirolizado en la última iteración, así como la evolución temporal de la masa por pirolizar y ya pirolizada en todo el dominio.
- `solver.solver_EnergyEq`. Se actualiza el algoritmo de resolución para que tenga en consideración todas las funciones comentadas anteriormente.

El flujo de trabajo de las funciones que conforman el modelo #1 se resume en la Figura 4.4, mientras que su planteamiento se muestra de forma esquemática en la Figura 4.5. La validación de dicho modelo se lleva a cabo en la Sección 5.3 “Modelo #1 - Pirólisis”.

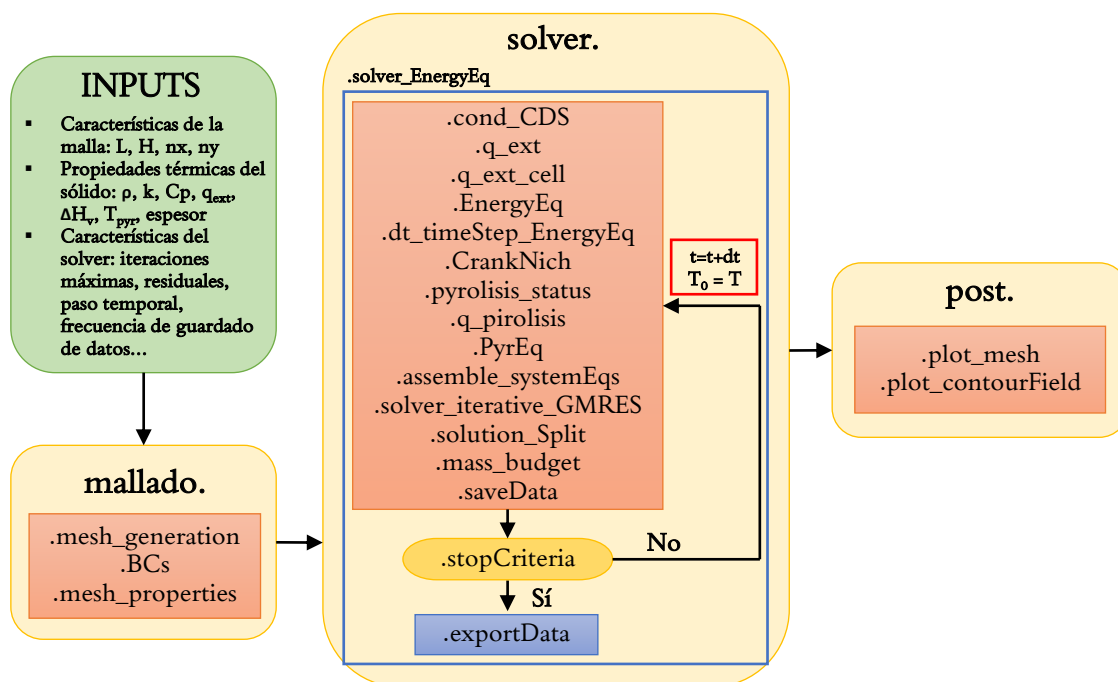


Figura 4.4: Modelos de incendio - Esquema de las funciones implementadas para el Modelo #1.

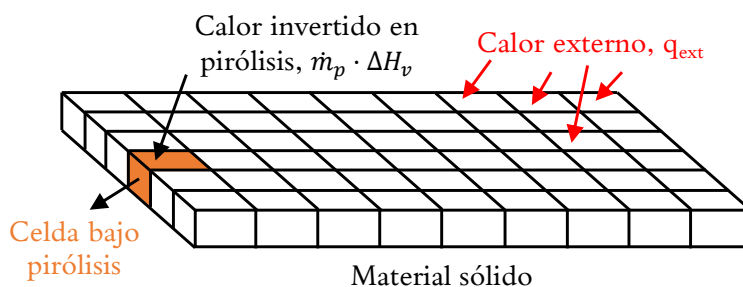


Figura 4.5: Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el Modelo #1.

4.3.3. Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad

El modelo #2 resuelve el comportamiento térmico transitorio del material sólido sometido a los efectos de la conducción, la pirólisis, la emisividad y la aplicación de una fuente de calor externa, cuyo valor es constante e invariable a lo largo del tiempo. En este sentido, el término fuente \dot{q}_s''' de la Ecuación de conservación de la Energía Térmica (ver Ecuación (4.1.1)) cuenta con la contribución de la fuente de calor externo y de los sumideros representados por el calor invertido en pirolizar la materia sólida y el calor emitido por un material con emisividad no nula. Siguiendo la estructura del “Modelo #1 - Pirólisis”, este modelo diferencia de nuevo dos partes o fases:

1. **Calentamiento de la materia sólida.** Durante esta etapa, el comportamiento térmico de la materia está gobernado por la **Ecuación de conservación de la Energía Térmica**. En ella, se incluyen los términos transitorio, difusivo y fuente, donde este último cuenta con la contribución de la fuente de calor externa aplicada y el sumidero representado por el calor emitido por la materia sólida a causa de su emisividad. La incógnita a resolver bajo este régimen es la **temperatura de la celda** de la Ecuación (4.3.3).

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T)) + \dot{q}_{ext}''' - \dot{q}_{emis}''' \rightarrow \boxed{T = \text{incógnita}} \quad (4.3.3)$$

2. **Pirólisis.** Una vez se alcanza la temperatura de pirólisis, el comportamiento térmico queda definido por la **Ecuación de la Pirólisis**, de manera que el cambio de “fase” de la materia sólida tiene lugar a temperatura constante y la incógnita a resolver es el **flujo de masa pirolizada** de la Ecuación (4.3.4).

$$0 = \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T)) + \dot{q}_{ext}''' - \dot{q}_{emis}''' - \dot{m}_p''' \cdot \Delta H_v \rightarrow \boxed{\dot{m}_p''' = \text{incógnita}} \quad (4.3.4)$$

Por tanto, el modelo #2 se encarga de resolver dos problemas acoplados: calentamiento según la Ecuación de conservación de la Energía Térmica y pirólisis según la Ecuación de la Pirólisis, donde la temperatura de la celda determina si debe resolver uno u otro. Para ello, el código añade y/o modifica las siguientes funciones con respecto al “Modelo #1 - Pirólisis”:

- `solver.q_radFloor`. Se encarga de la discretización espacial del calor emitido por el material sólido a causa de su emisividad (i.e. radiación al ambiente).
- `solver.EnergyEq`. Se modifica esta función para considerar la contribución del calor emitido por la radiación superficial del material de estudio.

El flujo de trabajo de las funciones que conforman el modelo #2 se resume en la Figura 4.6, mientras que su planteamiento se muestra de forma esquemática en la Figura 4.7. La validación de dicho modelo se lleva a cabo en la Sección 5.4 “Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad”.

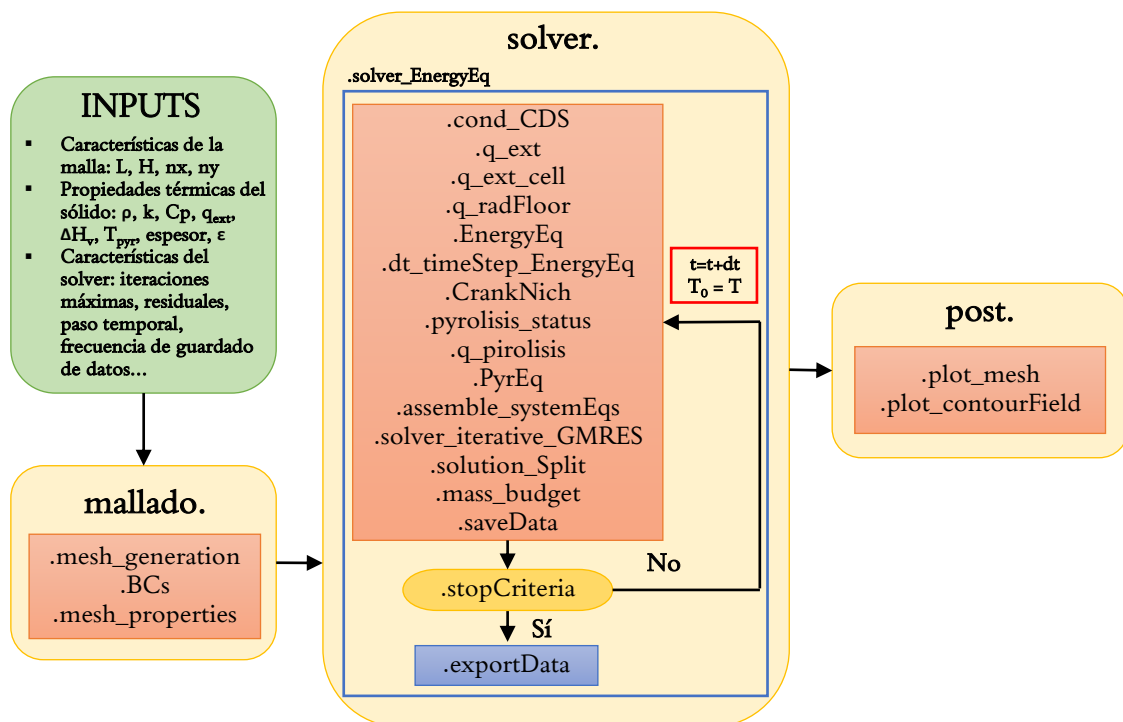


Figura 4.6: Modelos de incendio - Esquema de las funciones implementadas para el Modelo #2.

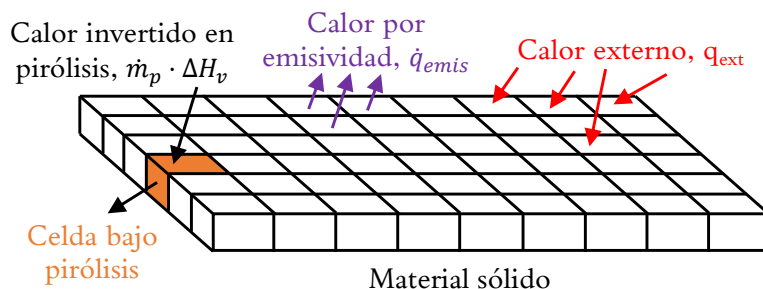


Figura 4.7: Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el Modelo #2.

Cabe apuntar que el calor emitido por el material sólido, \dot{q}_{emis} , se calcula a partir de la **ley de radiación de Stefan-Boltzman**, cuya expresión se recoge en la Ecuación (4.3.5) [33].

$$\dot{q}_{emis} = \epsilon \cdot \sigma \cdot A \cdot (T^4 - T_{\infty}^4) \quad (4.3.5)$$

donde:

- ϵ es la emisividad del material ($0 < \epsilon < 1$), parámetro adimensional.
- σ es la constante de Stefan-Boltzman, con valor de $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$ según unidades SI.
- A es el área de material expuesta en m^2 según unidades SI.
- T y T_{∞} son la temperatura del sólido y del ambiente, respectivamente, en K según unidades SI.

4.3.4. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama

El **modelo #3** resuelve el **comportamiento térmico transitorio del material sólido sometido a los efectos de la conducción, la pirólisis, la emisividad, la radiación de una llama y la aplicación de una fuente de calor externa, cuyo valor es constante e invariable a lo largo del tiempo**. En este sentido, el término fuente \dot{q}_s''' de la Ecuación de conservación de la Energía Térmica (ver Ecuación (4.1.1)) cuenta con la contribución de las fuentes de calor externo y calor emitido por la radiación de la llama, mientras que el calor invertido en pirolizar la materia sólida y el calor emitido por un material con emisividad no nula representan los sumideros. Siguiendo la estructura del “Modelo #1 - Pirólisis” y “Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad”, este modelo diferencia de nuevo dos partes, si bien ya considera las cinco fases del incendio introducidas en la Subsección 2.2.2 “*Sección macroscópica*”:

1. **Calentamiento de la materia sólida.** Durante esta etapa, el comportamiento térmico de la materia está gobernado por la **Ecuación de conservación de la Energía Térmica**. En ella, se incluyen los términos transitorio, difusivo y fuente, donde este último cuenta con la contribución de las fuentes de calor externo aplicado y radiación proveniente de una eventual llama, así como el sumidero representado por el calor emitido por la materia sólida. La incógnita a resolver bajo este régimen es la **temperatura de la celda** de la Ecuación (4.3.6).

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T)) + \dot{q}_{ext}''' - \dot{q}_{emis}''' + \dot{q}_{f,r,abs}''' \rightarrow \boxed{T = \text{incógnita}} \quad (4.3.6)$$

2. **Pirólisis.** Una vez se alcanza la temperatura de pirólisis, el comportamiento térmico queda definido por la **Ecuación de la Pirólisis**, de manera que el cambio de "fase" de la materia sólida tiene lugar a temperatura constante y la incógnita a resolver es el **flujo de masa pirolizada** de la Ecuación (4.3.7).

$$0 = \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T)) + \dot{q}_{ext}''' - \dot{q}_{emis}''' - \dot{m}_p''' \cdot \Delta H_v + \dot{q}_{f,r,abs}''' \rightarrow \boxed{\dot{m}_p''' = \text{incógnita}} \quad (4.3.7)$$

El modelo #3 introduce las tres fases restantes del incendio, cuyo modelado se detalla a continuación, a través del calor absorbido por la materia sólida proveniente de la radiación emitida por la llama generada, $\dot{q}_{f,r,abs}'''$; contribución introducida tanto en la Ecuación (4.3.6) como (4.3.7).

3. **Ignición.** El gas pirolizado se mezcla rápidamente con el aire circundante, de forma que el inicio de la **combustión con llama es inmediatamente posterior a la pirólisis de la materia sólida**. En este sentido, el calor liberado por la llama, \dot{q}_f , se calcula mediante la Ecuación (2.2.8).
4. **Propagación de la llama.** Una vez se ha generado la llama, parte del calor liberado por el fuego se invierte en seguir pirolizando materia sólida "fresca". Concretamente, en este punto únicamente se considera el **calor emitido por la llama mediante radiación**, $\dot{q}_{f,r}$, el cual se calcula de acuerdo con la Ecuación (2.2.9). Esta potencia incide sobre las superficies circundantes, estimándose el **flujo de calor incidente** o irradiancia a partir del **modelo del origen puntual** (en inglés, *Point Source Model*) [34]. De esta forma, la llama se simplifica como un punto ubicado en el centro geométrico de la llama real, el cual irradia calor según la Ecuación (4.3.8).

$$\dot{q}_{f,r,inc}'' = \frac{\dot{q}_{f,r} \cdot \sin(\theta)}{4 \cdot \pi \cdot R^2} \quad (4.3.8)$$

donde:

- θ es el ángulo entre el vector normal a la superficie objetivo y la línea de visión entre el punto origen y objetivo, tal y como recoge la Figura 4.8.
- R es la distancia entre el punto origen y objetivo, obtenida como $R = \sqrt{L^2 + (H/2)^2}$.

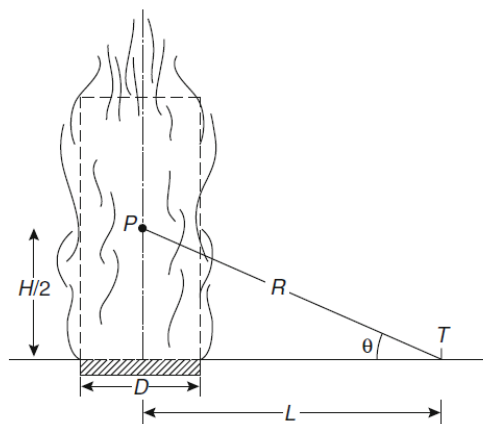


Figura 4.8: Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del modelo del origen puntual para el cálculo del flujo emitido mediante radiación por una llama [34].

Este flujo de calor incide sobre la superficie objetivo, la cual únicamente absorbe una fracción de dicho calor. Según la ley de Kirchoff, la capacidad de absorción de una sustancia es igual a su emisividad ($\alpha = \epsilon$) [33], de manera que la Ecuación (4.3.9) determina la **fracción de calor incidente que es absorbida por la materia sólida**, $\dot{q}_{f,r,abs}$.

$$\dot{q}_{f,r,abs} = \epsilon \cdot \dot{q}_{f,r,inc} = \epsilon \cdot \dot{q}_{f,r,inc}'' \cdot A_{inc} \quad (4.3.9)$$

donde A_{inc} es la área sobre la que incide el flujo de calor $\dot{q}_{f,r,inc}''$.

Por su parte, la **altura de la llama real**, H , se determina mediante la correlación de Heskestad [19], cuya expresión se recoge en la Ecuación (4.3.10).

$$\frac{H}{D} = 3,7 \cdot Q^{* 2/5} - 1,02 \quad (4.3.10)$$

donde:

- Q^* se calcula según la Ecuación (4.3.11), siendo ρ_∞ , $C_{p,\infty}$ y T_∞ la densidad, calor específico y temperatura del aire ambiente, expresados en kg/m^3 , $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ y K , respectivamente; y g la aceleración de la gravedad en m/s^2 .

$$Q^* = \frac{\dot{q}_f}{\rho_\infty \cdot C_{p,\infty} \cdot T_\infty \cdot \sqrt{g \cdot D} \cdot D^2} \quad (4.3.11)$$

- D es el diámetro del área de incendio en m según unidades SI, el cual se obtiene como $D = \sqrt{4 \cdot A_{llama} / \pi}$ para fuegos de extensión no cilíndrica.

Sobre los fundamentos matemáticos del **modelo del origen puntual**, se estudian dos variantes adicionales, las cuales incrementan gradualmente tanto el coste computacional del código como la precisión del cálculo de la irradiancia (ver Figura 4.9):

- **Modelo del origen puntual con discretización en altura.** La irradiancia de la llama se calcula desde diversos puntos contenidos en la altura de la llama, obteniéndose su valor medio para calcular el calor incidente sobre el material sólido.
- **Modelo del origen puntual con discretización en altura y base.** Además de discretizar la llama en altura, se consideran diversos puntos contenidos en el plano de la base de llama para cada cota, obteniéndose finalmente su valor medio.

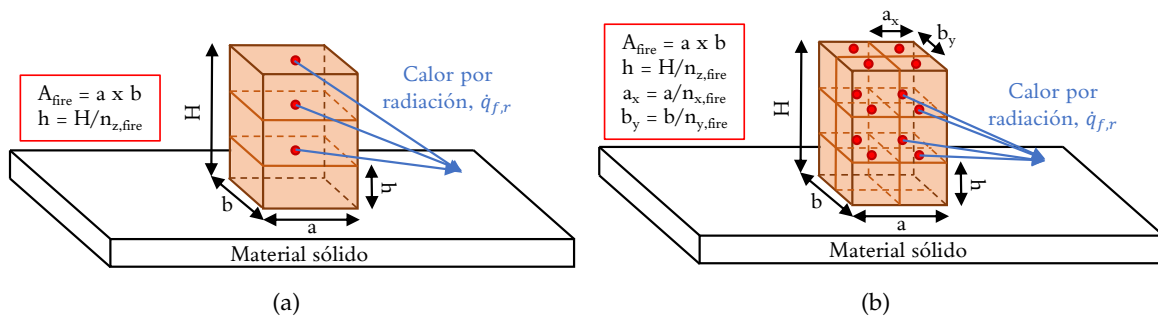


Figura 4.9: Modelos de incendio - Esquemas ilustrativos del modelo de origen puntual con: (a) Discretización en altura, y b) Discretización en altura y base.

5. **Desarrollo del fuego.** A medida que se genera gas pirolizado, la extensión del fuego aumenta sin restricciones de oxidante, es decir, la **combustión es libre** (exceso de aire).

Para considerar el calor emitido por la llama mediante radiación, el código añade y/o modifica las siguientes funciones con respecto al “Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad”:

- `mesh.mesh_generation_subgrid`. Genera una malla 2ⁿ veces más fina que la malla inicial, la cual puede emplearse para discretizar una eventual llama sobre su base.
- `solver.initial_temperature`. Calcula la temperatura inicial del dominio.
- `solver.initial_mass`. Computa la masa inicial del dominio.
- `solver.HRRCalculation`. Obtiene la tasa de calor liberado por la aparición de una eventual llama, la cual puede ser forzada (encendido provocado) o auto-encendida.
- `solver.fireCalculation`. Calcula las dimensiones de la llama y el calor de radiación emitido por la misma a la materia sólida circundante (flujo de calor incidente).
- `solver.q_absFlame`. Computa la porción del flujo de calor incidente que es absorbida por la materia sólida.
- `solver.EnergyEq`. Se modifica para incluir el calor absorbido por la materia sólida a partir del flujo de calor incidente proveniente de la radiación de la llama.
- `solver.saveData`. Se modifica para almacenar la evolución temporal de nuevas variables de interés (tasa de liberación de calor, flujo de calor incidente, flujo de calor absorbido...).
- `solver.exportData`. Exporta a un fichero de texto las variables de interés.
- `solver.solver_EnergyEq`. Se actualiza el algoritmo de resolución para incluir el calor absorbido por la materia sólida que proviene de la radiación emitida por la llama.

El flujo de trabajo de las funciones del modelo #3 se resume en la Figura 4.11, mientras que su planteamiento se muestra de forma esquemática en la Figura 4.10. La validación de dicho modelo se lleva a cabo en la Sección 5.5 “Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama”.

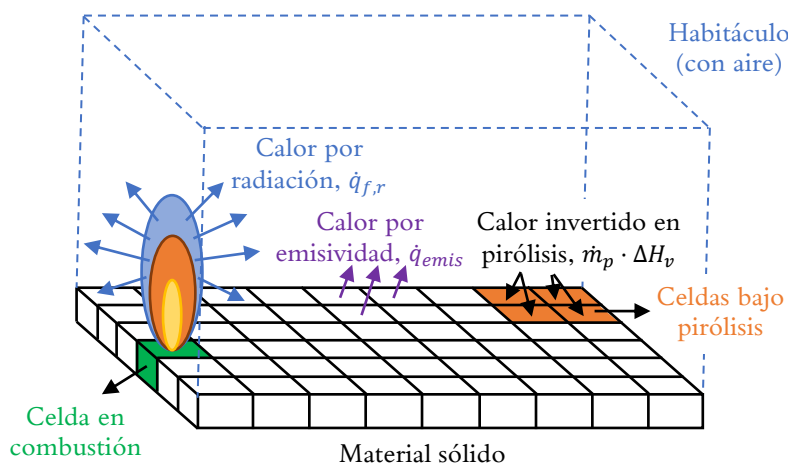


Figura 4.10: Modelos de incendio - Esquema ilustrativo del dominio computacional y los flujos de calor considerados para el Modelo #3.

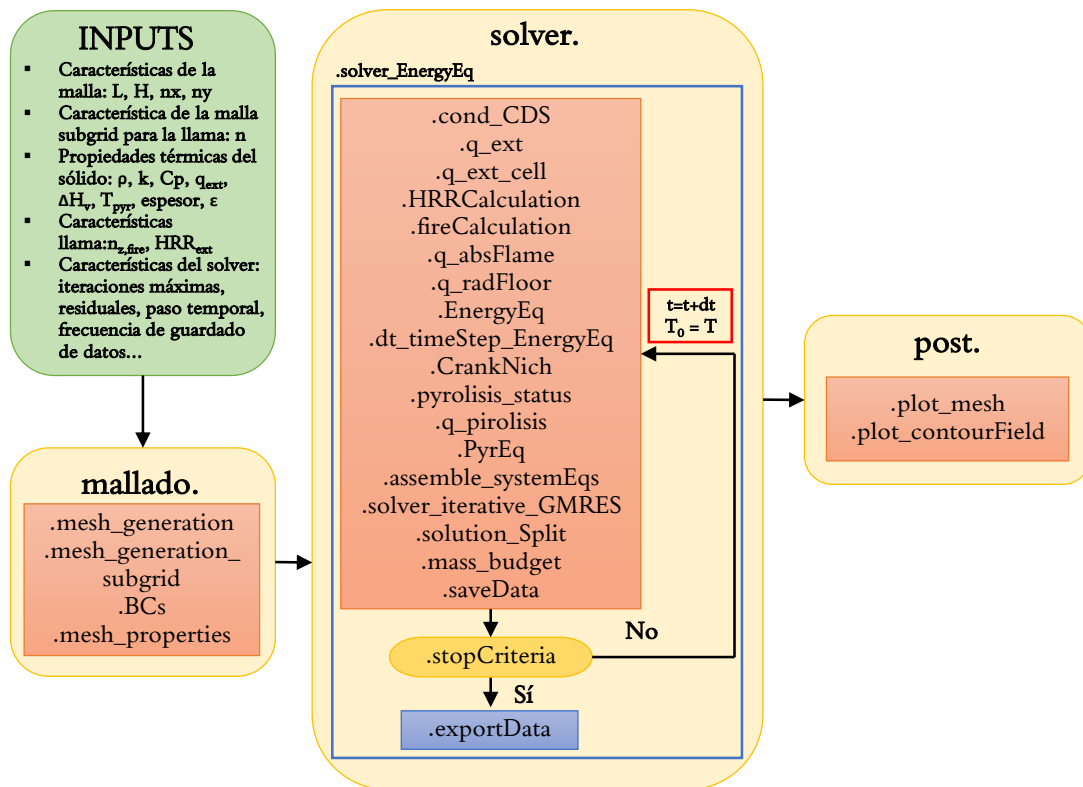


Figura 4.11: Modelos de incendio - Esquema de las funciones implementadas para el Modelo #3.

El código CFD desarrollado, de acuerdo con la normativa TFM UNIR, se publica bajo la licencia GNU versión 3 en la plataforma GitHub. En concreto, el siguiente enlace puede accederse para visualizar el código CFD: <https://github.com/sesanrie/CFD-Code-for-Fire-Load-Calculations-2D.git>

Capítulo 5

Análisis de resultados y validación del código CFD

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos a partir de los diferentes modelos CFD desarrollados, cuyos fundamentos matemáticos ya han sido presentados en el Capítulo 4 “Desarrollo del código CFD”. Para ello, en primer lugar, se describen las propiedades físicas a caracterizar previamente acerca del material sólido de estudio. Posteriormente, se describen las validaciones realizadas mediante los programas de simulación Ansys Fluent® y FDS®.

5.1. Caracterización del material sólido

Como paso previo a la resolución de su combustión, resulta esencial llevar a cabo la **caracterización de las propiedades del material sólido**. A lo largo del presente Trabajo Final de Máster, se opta por el estudio de un **polietileno de alta densidad** (C_2H_4)_n, dado que es la base de multitud de **polímeros halogenados** como el policloruro de vinilo (PVC). Dichos materiales se obtienen reemplazando los átomos de hidrógeno por halógenos, tales como el fluor F o el cloro Cl, los cuales actúan como inhibidores de llama mediante la producción de una elevada cantidad de material sólido carbonizado. Por su parte, el **polietileno de alta densidad no produce carbonizado sólido**, por lo que resulta ideal para el estudio de la **combustión con llama**; propósito del presente proyecto de investigación. Sus propiedades se resumen en la Tabla 5.1 [17] [35].

Polietileno de alta densidad (C_2H_4) _n			
Variable	Valor	Variable	Valor
Densidad, ρ (kg/m ³)	950	Conductividad térmica, k (W/(m·K))	0,425
Calor específico, C_p (J/(kg·K))	2075	Temperatura de ignición (K)	685
Energía combustión, ΔH_c (MJ/kg)	43,6	Energía vaporización, ΔH_v (MJ/kg)	2,05
Eficiencia combustión, η	0,881	Energía química, ΔH_{ch} (MJ/kg)	38,4
Fracción calor convección, χ_c	0,568	Energía de convección, ΔH_{conv} (MJ/kg)	21,8
Fracción calor radiación, χ_r	0,432	Energía de radiación, ΔH_{rad} (MJ/kg)	16,6

Tabla 5.1: Caracterización del material sólido - Resumen de las propiedades físicas del polietileno de alta densidad (C_2H_4)_n.

5.2. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante

El **modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante**, encargado de resolver el comportamiento térmico transitorio del material sólido sujeto a los fenómenos conductivos y la aplicación de una fuente de calor externa, se valida mediante las siguientes simulaciones de Ansys Fluent®:

1. **Conducción pura en la dirección "X"**, de forma que se valida la resolución de los flujos conductivos en tal dirección junto con la aplicación de las condiciones de contorno de tipo Dirichlet (i.e. temperatura constante).
2. **Conducción pura en la dirección "Y"**, con tal de verificar el cálculo de los flujos conductivos en dicha dirección, así como el uso de las condiciones de contorno de tipo Dirichlet (i.e. temperatura constante).
3. **Conducción con fuente de calor**, para validar la adición de una fuente de calor constante.

En todas ellas, se configura un **dominio bidimensional cuadrado** igual a 2×2 m, empleándose un **mallado cartesiano uniforme** caracterizado por el empleo de 20 celdas para la discretización de cada dirección ($20 \times 20 = 400$ celdas; misma malla en el código CFD que ANSYS Fluent®). En lo referente al **material** empleado, se definen la densidad, conductividad térmica y calor específico del **polietileno de alta densidad**, cuyas propiedades se recogen en la Tabla 5.1. Por su lado, en la Figura 5.1 se muestran las **condiciones de contorno** aplicadas en cada caso, mientras que el **paso temporal** empleado es igual a 400 s. Así mismo, la **convergencia de la solución** se determina una vez la solución alcanza el estado estacionario, monitorizándose para ello la **evolución temporal de la temperatura media** en el dominio de cálculo. Por último, se obtienen los **contornos de temperatura de la solución estacionaria**, así como el **perfil de temperaturas a lo largo de los planos medios del dominio** ($X = 1$ m; $Y = 1$ m).

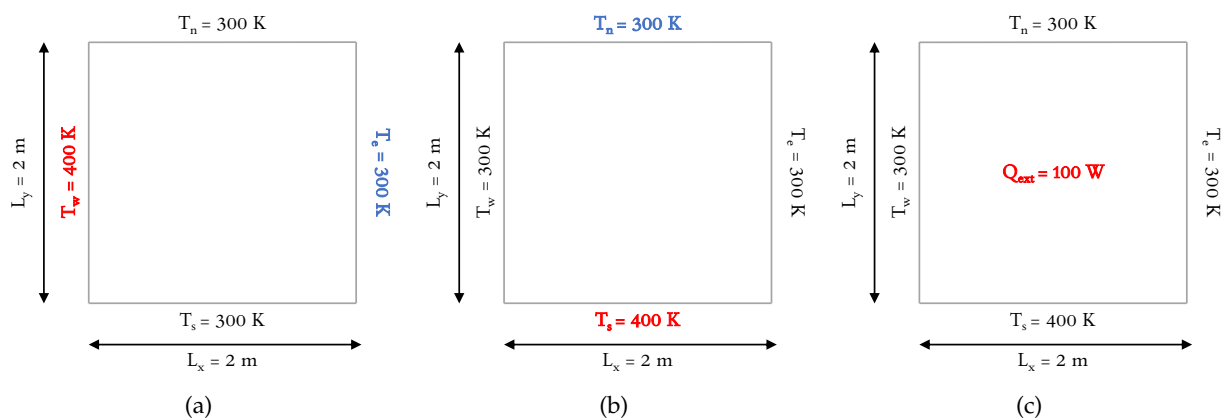


Figura 5.1: Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Esquemas ilustrativos de las condiciones de contorno de: (a) Conducción pura en la dirección "X", (b) Conducción pura en la dirección "Y", y (c) Conducción con fuente de calor.

a) Conducción pura en la dirección "X".

En la Figura 5.2 se recogen las comparativas de la evolución temporal de la temperatura media en el dominio, así como los perfiles de temperatura estacionarios para los planos medios del dominio ($X = 1$ m; $Y = 1$ m). Por su lado, en la Figura 5.3 se comparan los contornos obtenidos para la solución estacionaria.

5.2. Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante

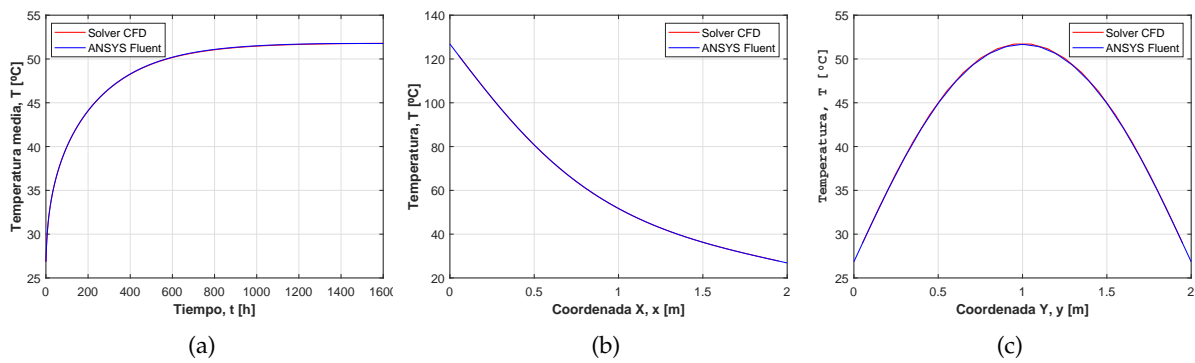


Figura 5.2: Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción pura en la dirección "X": (a) Evolución temporal de la temperatura media, (b) Perfil de la temperatura estacionaria en $Y = 1$ m, y (c) Perfil de la temperatura estacionaria en $X = 1$ m.

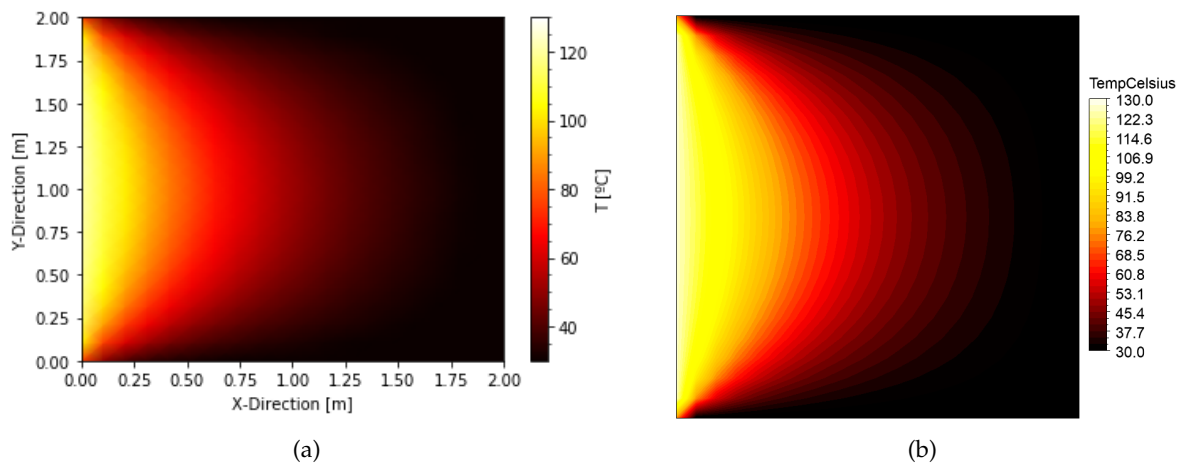


Figura 5.3: Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción pura en la dirección "X": (a) Contorno de temperatura estacionaria del solver CFD, y (b) Contorno de temperatura estacionaria en ANSYS Fluent®.

b) Conducción pura en la dirección "Y".

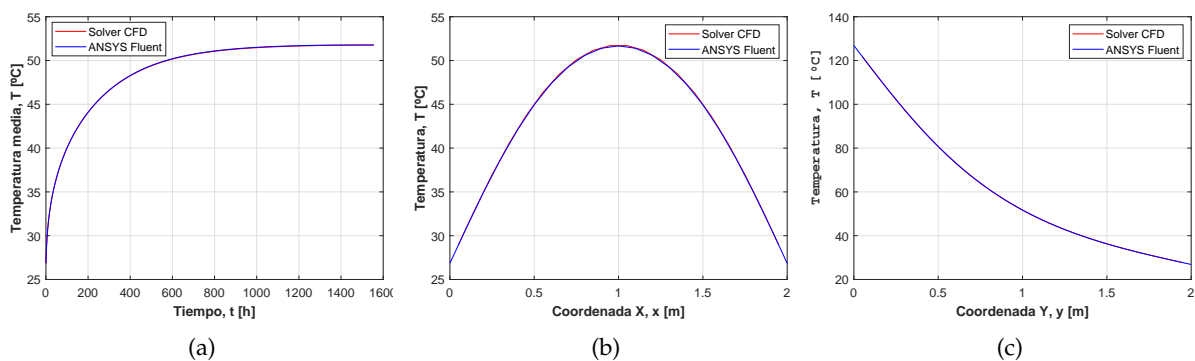


Figura 5.4: Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción pura en la dirección "Y": (a) Evolución temporal de la temperatura media, (b) Perfil de la temperatura estacionaria en $Y = 1$ m, y (c) Perfil de la temperatura estacionaria en $X = 1$ m.

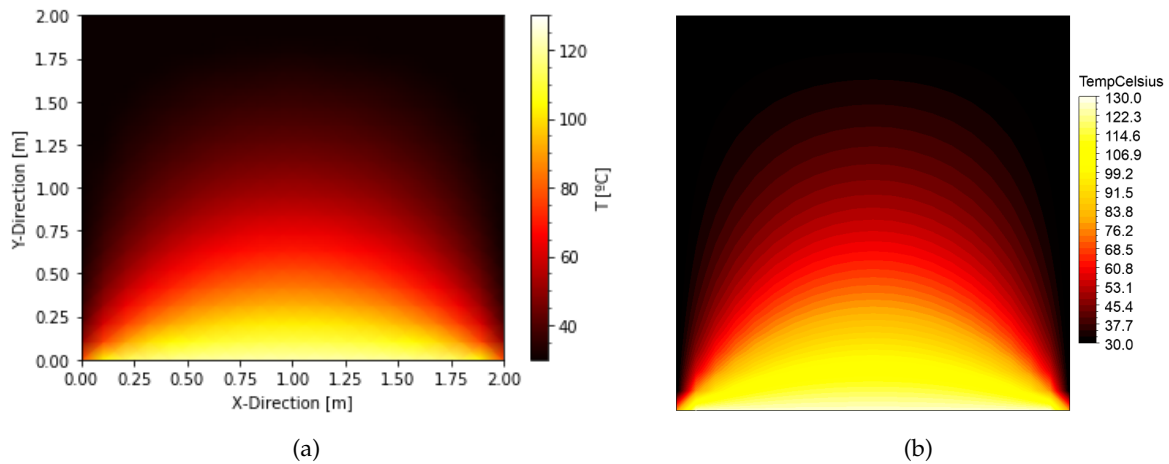


Figura 5.5: Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción pura en la dirección “Y”: (a) Contorno de temperatura estacionaria del solver CFD, y (b) Contorno de temperatura estacionaria en ANSYS Fluent®.

La Figura 5.4 recoge la evolución temporal de la temperatura media en el dominio, así como los perfiles de temperatura estacionarios para los planos medios del dominio ($X = 1 \text{ m}$; $Y = 1 \text{ m}$); mientras que la Figura 5.5 muestra los contornos de la solución estacionaria.

c) Conducción con fuente de calor.

La Figura 5.6 muestra la evolución temporal de la temperatura media en el dominio, así como los perfiles de temperatura estacionarios para los planos medios del dominio ($X = 1 \text{ m}$; $Y = 1 \text{ m}$). Además, en la Figura 5.7 se recogen los contornos de la solución estacionaria.

Ya que los resultados obtenidos son prácticamente idénticos para los 3 casos simulados, el **modelo #0 del solver CFD queda validado**. Cabe apuntar que se prescinde del estudio de convergencia de malla y de paso temporal, ya que el propósito de las simulaciones presentadas reside en validar las discretizaciones espaciales empleadas, con independencia del tamaño de malla y paso temporal. Así mismo, notar que los tiempos difusivos para el material sólido asignado son elevados (horas), por lo que el término conductivo podría considerarse como **despreciable** en los siguientes modelos.

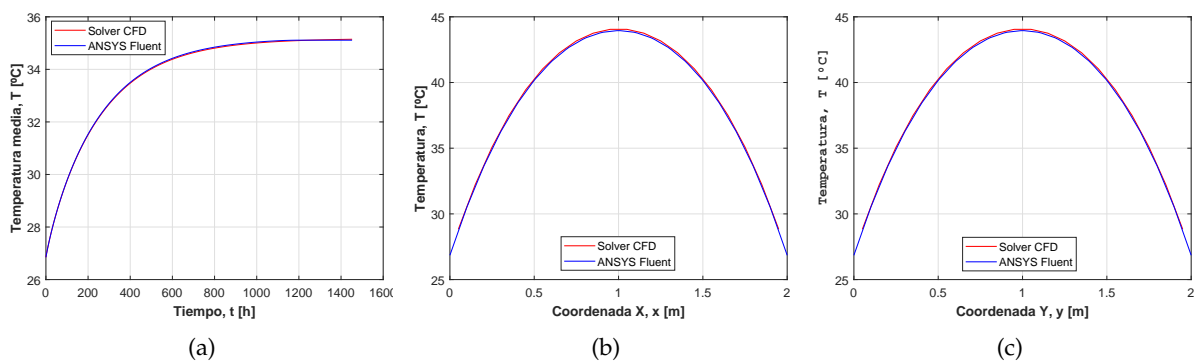


Figura 5.6: Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción con fuente de calor: (a) Evolución temporal de la temperatura media, (b) Perfil de la temperatura estacionaria en $Y = 1 \text{ m}$, y (c) Perfil de la temperatura estacionaria en $X = 1 \text{ m}$.

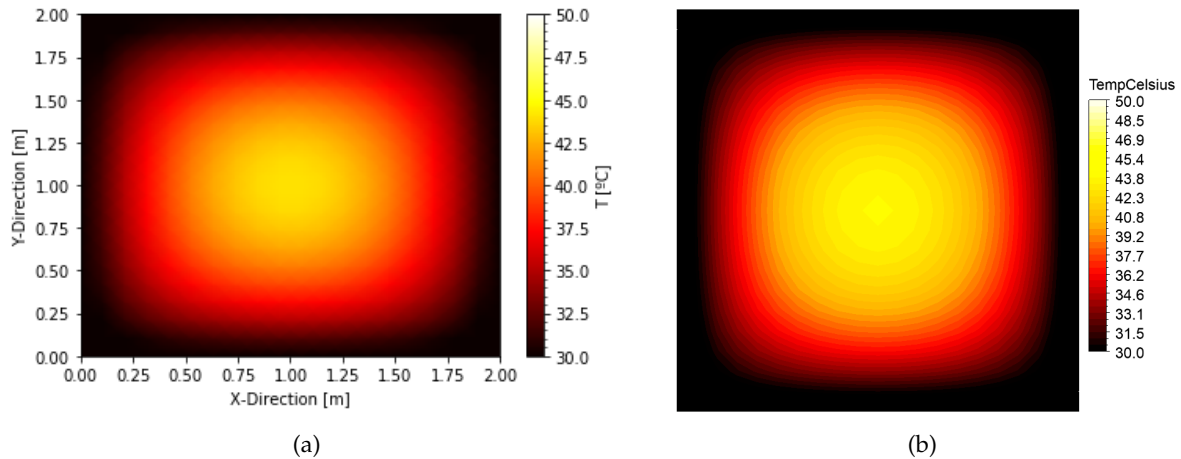


Figura 5.7: Modelo #0 - Conducción con fuente de calor constante - Comparativas de conducción con fuente de calor: (a) Contorno de temperatura estacionaria del solver CFD, y (b) Contorno de temperatura estacionaria en ANSYS Fluent®.

5.3. Modelo #1 - Pirólisis

El **modelo #1 - Pirólisis**, encargado de resolver el comportamiento térmico transitorio del material sólido sujeto a los fenómenos conductivos, la pirólisis y la aplicación de una fuente de calor externa, se valida mediante dos simulaciones de FDS®. En ellas, se configura un **dominio bidimensional cuadrado** igual a 2×2 m, empleándose un **mallado cartesiano uniforme** caracterizado por el empleo de 20 celdas para la discretización de cada dirección ($20 \times 20 = 400$ celdas; misma malla en el código CFD que FDS®). En lo referente al **material** empleado, se definen la densidad, conductividad térmica, calor específico, temperatura de pirólisis y energía de vaporización del **polietileno de alta densidad**, cuyas propiedades se recogen en la Tabla 5.1. Además, el **espesor** de la placa es igual a 0,001 m (1 mm), por lo que la **masa inicial** de material sólido es igual a 3,8 kg. Por su lado, en la Figura 5.8 se muestran las **condiciones de contorno** aplicadas en cada caso (paredes adiabáticas), así como la posición de la fuente de calor igual a 2500 W/m^3 . El **paso temporal** empleado es igual a 1 s, mientras que el **número de pasos temporales** se establece en 1000, ya que es tiempo suficiente para transicionar desde la fase de calentamiento a la pirólisis del material sólido. Por último, se analiza la **evolución temporal de la temperatura media y el espesor promedio** con objeto de validar el código CFD desarrollado.

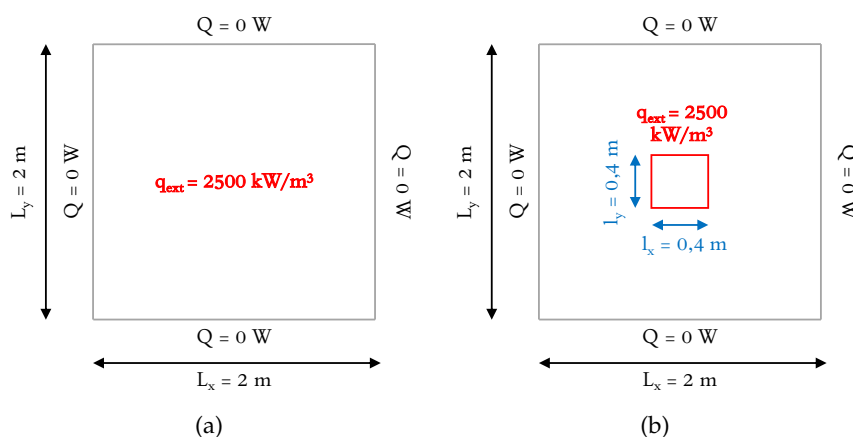


Figura 5.8: Modelo #1 - Pirólisis - Esquema ilustrativo de las condiciones de contorno de: (a) Fuente de calor uniforme, y (b) Fuente de calor en el centro del dominio.

a) Fuente de calor uniforme.

En la Figura 5.9 se recogen las comparativas de la evolución temporal de la temperatura media en el dominio, así como la evolución temporal de la masa sólida por pirolizar. Atendiendo a los resultados, cabe apuntar que existe una ligera desviación debida al inicio de la pirólisis en el software FDS®. Tal y como se aprecia en la Figura 5.9 (a), la pirólisis se establece a 406°C en lugar de a los 412°C del Modelo #1. Este hecho se debe a que la formulación de la pirólisis en FDS® está gobernada por la curva definida en la Figura 2.2, de manera que resulta necesario introducir un rango de pirólisis. En este caso, dicho rango se ha definido como 412 ± 10 °C con el propósito de lograr la ventana de pirólisis más estrecha posible dentro de los límites de estabilidad y convergencia numérica del programa. De todas formas, esta desviación introduce un error mínimo en la pirólisis de la masa, resumida en la Figura 5.9 (b).

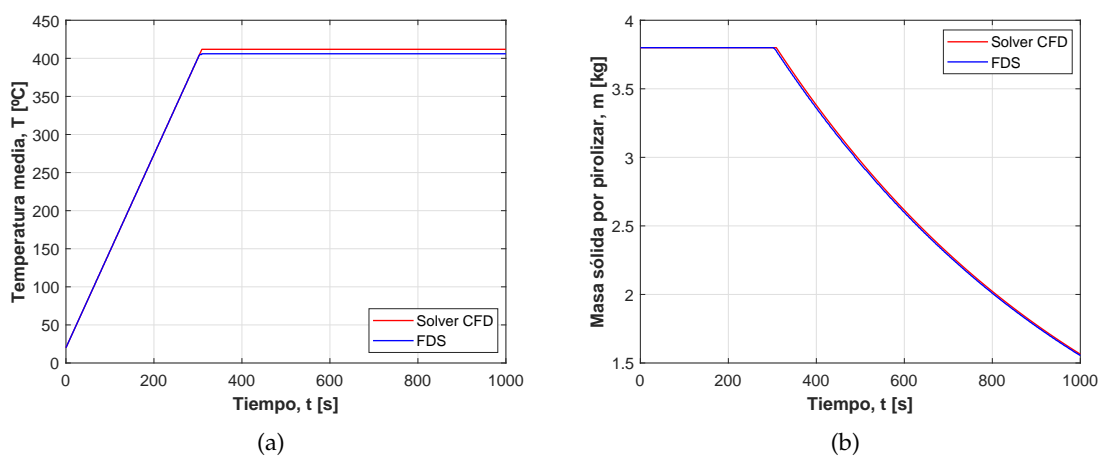


Figura 5.9: Modelo #1 - Pirólisis - Comparativas para fuente de calor uniforme de: (a) Evolución temporal de la temperatura media, y (b) Evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.

b) Fuente de calor en el centro del dominio.

En la Figura 5.10 se recogen las comparativas de la evolución temporal de la temperatura media en el dominio, así como la evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.

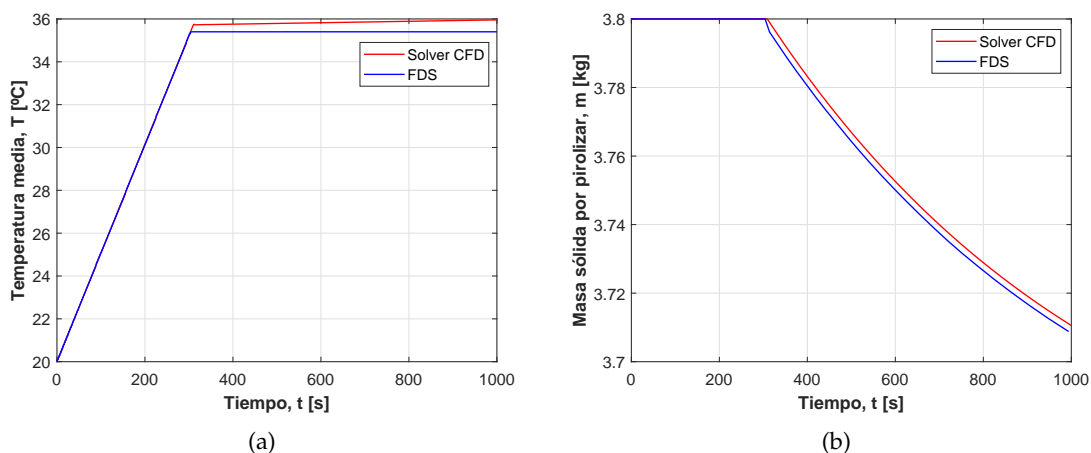


Figura 5.10: Modelo #1 - Pirólisis - Comparativas para fuente de calor en el centro del dominio de: (a) Evolución temporal de la temperatura media, y (b) Evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.

Según la Figura 5.10, de nuevo se observa una ligera desviación debida al modelado de la pirólisis en cada resolovedor (solver CFD o FDS[®]); tal y como se ha comentado en el caso del Modelo #1 “a) Fuente de calor uniforme”. Además, en la Figura 5.10 (a) puede apreciarse que los flujos conductivos en el interior del material provocan el aumento de la temperatura media del dominio aunque la zona central del dominio (donde se ubica la fuente de calor) esté siendo pirolizada a temperatura constante. Sin embargo, FDS[®] desprecia la conducción en el plano del material, de manera que la temperatura permanece constante una vez la fase de pirólisis se inicia en la zona central. Pese a ello, cabe apuntar que el incremento de temperatura en el dominio es prácticamente nulo, por lo que la hipótesis de trabajo de FDS[®] no induce desviaciones importantes en los resultados para los tiempos de cálculo considerados (cortos en comparación con los tiempos característicos de un material con baja conductividad, como es el caso del polietileno de alta densidad $(C_2H_4)_n$). Por todo ello, **el modelo #1 queda validado**.

5.4. Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad

El **modelo #2 - Pirólisis y Emisividad**, encargado de resolver el comportamiento térmico transitorio del material sólido sujeto a los fenómenos conductivos, la pirólisis, el calor de radiación debido a la emisividad de la superficie y la aplicación de una fuente de calor externa, se valida mediante dos simulaciones de FDS[®]. En ellas, se configura un **dominio bidimensional cuadrado** igual a 2×2 m, empleándose un **mallado cartesiano uniforme** caracterizado por el empleo de 20 celdas para la discretización de cada dirección ($20 \times 20 = 400$ celdas; misma malla en el código CFD que FDS[®]). En lo referente al **material** empleado, se definen la densidad, conductividad térmica, calor específico, temperatura de pirólisis y energía de vaporización del **polietileno de alta densidad**, cuyas propiedades se recogen en la Tabla 5.1. Por cuanto respecta a la **emisividad**, se asigna un valor igual a $\epsilon = 0,9$, al tratarse de un valor habitual para plásticos y espumas. Además, el **espesor** de la placa es igual a 0,001 m (1 mm), por lo que la **masa inicial** de material sólido es igual a 3,8 kg. Por su lado, en la Figura 5.11 se muestran las **condiciones de contorno** aplicadas en cada caso (paredes adiabáticas), así como la posición de la fuente de calor igual a 12500 W/m^3 . El **paso temporal** empleado es igual a 1 s, mientras que el **número de pasos temporales** se establece en 1000, ya que es tiempo suficiente para transicionar desde la fase de calentamiento a la fase de pirólisis del material sólido. Por último, se analiza la **evolución temporal de la temperatura media y el espesor promedio** con objeto de validar el código CFD.

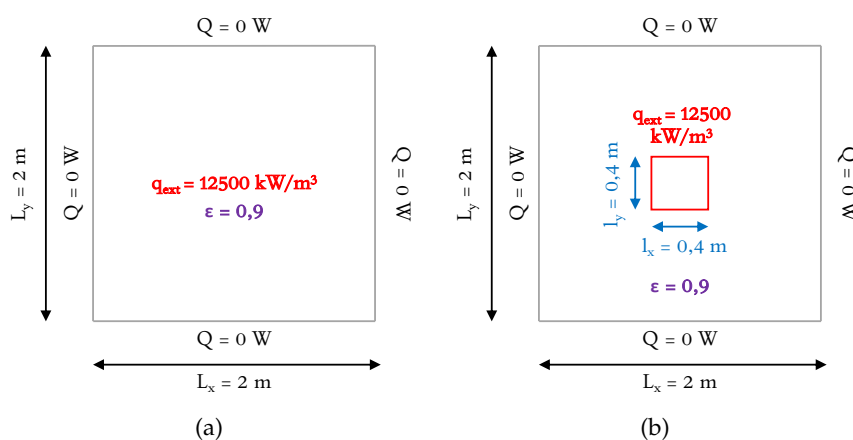


Figura 5.11: Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad - Esquema ilustrativo de las condiciones de contorno de: (a) Fuente de calor uniforme, y (b) Fuente de calor en el centro del dominio.

a) Fuente de calor uniforme.

En la Figura 5.12 se recogen las comparativas de la evolución temporal de la temperatura media en el dominio, así como la evolución temporal de la masa sólida por pirolizar. Atendiendo a los resultados, la Figura 5.12 (a) muestra que la fase de calentamiento del material se ha capturado perfectamente, si bien se obtiene una desviación cercana a los 15-20°C en la temperatura de pirólisis (392°C-396°C en FDS®, frente a los 412°C del solver CFD). Este hecho se traslada en una diferencia notable en las curvas de masa sólida por pirolizar, mostradas en la Figura 5.12 (b), dado que las pérdidas de calor por emisividad se escalan con la temperatura del material a la cuarta potencia. Por ello, la velocidad de pirólisis es mayor en FDS®, al presentar una temperatura de pirólisis menor. Como se ha comentado previamente en la sección Sección 5.3 “Modelo #1 - Pirólisis”, la formulación de la pirólisis en FDS® está gobernada por la curva definida en la Figura 2.2, de manera que resulta necesario introducir un rango de pirólisis, estableciéndose la temperatura de pirólisis según la estabilidad y convergencia numérica del programa.

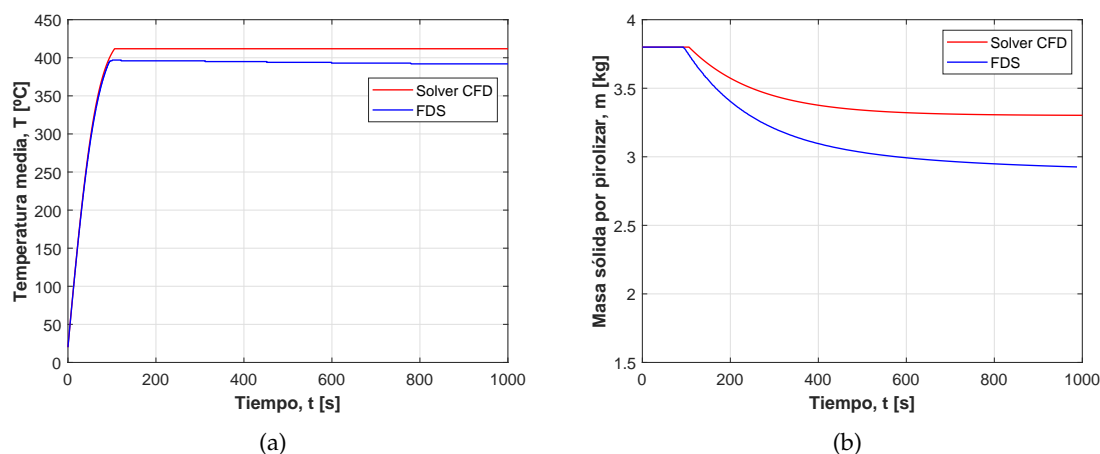


Figura 5.12: Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad - Comparativas para fuente de calor uniforme de: (a) Evolución temporal de la temperatura media, y (b) Evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.

b) Fuente de calor en el centro del dominio.

En la Figura 5.13 se recogen las comparativas de la evolución temporal de la temperatura media en el dominio, así como la evolución temporal de la masa sólida por pirolizar. Atendiendo a los resultados de la Figura 5.13, de nuevo se observa una ligera desviación en la temperatura de pirólisis debida al modelado de cada resolovedor (solver CFD o FDS®); si bien la fase de calentamiento se ha capturado perfectamente. Esta desviación se traduce en una diferencia mayor en la curva de la masa sólida por pirolizar, tal y como se refleja en la Figura 5.13 (b).

Por tanto, tras analizar tanto la fase de calentamiento como la fase de pirólisis, **el modelo #2 queda validado**, ya que el calentamiento del material se captura perfectamente. Por otro lado, la fase de pirólisis no se replica con respecto del programa FDS® por la diferencia en la definición de su modelado, punto a considerar para consiguientes análisis por la desviación notable que acarrea en la velocidad de pirólisis de la masa sólida.

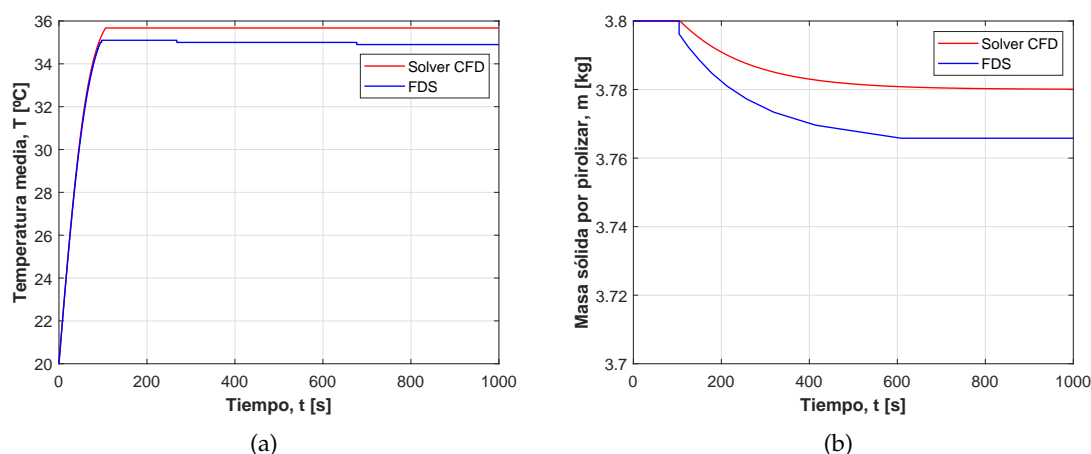


Figura 5.13: Modelo #2 - Pirólisis y Emisividad - Comparativas para fuente de calor en el centro del dominio de: (a) Evolución temporal de la temperatura media, y (b) Evolución temporal de la masa sólida por pirolizar.

Por último, antes de proceder a la validación del Modelo #3, se lleva a cabo un **análisis de órdenes de magnitud para los términos considerados en la Ecuación de Pirólisis** del Modelo #2. Así se evalúa la relevancia relativa del término asociado a la emisividad de la materia sólida y el error asociado a la diferencia en el modelado de la temperatura de pirólisis.

Partiendo de la Ecuación (4.3.4), cabe desprestigiar el término de los flujos conductivos tras las conclusiones alcanzadas en la Sección 5.3 “Modelo #1 - Pirólisis”, ya que los flujos conductivos son mucho más lentos en comparación al calentamiento del material a causa de la fuente externa de calor \dot{q}_{ext} . De esta manera, la masa pirolizada depende del balance entre la fuente de calor externa y las pérdidas debidas a la emisividad del material, siendo estas últimas función de la temperatura de pirólisis ($T_{pir,FDS}$ y $T_{pir,CFD}$). A continuación, en la Ecuación (5.4.1) se calcula el valor de cada contribución según el solver empleado, de manera que se aprecia una desviación de 4kW (10 %, aproximadamente) en el calor emitido por el material sólido mediante radiación al ambiente.

$$\dot{q}_{ext} = \dot{q}_{ext}''' \cdot A \cdot t = 12500 \cdot 2^2 \cdot 0,001 = 50kW$$

$$\dot{q}_{emis,CFD} = \epsilon \cdot \sigma \cdot A \cdot (T_{pir,CFD}^4 - T_{\infty}^4) = 0,9 \cdot 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot 2^2 \cdot (685^4 - 293^4) = 43,4kW \quad (5.4.1)$$

$$\dot{q}_{emis,FDS} = \epsilon \cdot \sigma \cdot A \cdot (T_{pir,FDS}^4 - T_{\infty}^4) = 0,9 \cdot 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot 2^2 \cdot (669^4 - 293^4) = 39,4kW$$

5.5. Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama

El **modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama**, encargado de resolver el comportamiento térmico transitorio del material sólido sujeto a los fenómenos conductivos, la pirólisis, el calor de radiación debido a la emisividad de la superficie, la radiación de una llama y la aplicación de una fuente de calor externa, se valida mediante una simulación de FDS®. En concreto, la validación se centra en verificar el **modelado de la radiación de la llama**, motivo por el cual se configura un **dominio tridimensional paralelepípedo** con dimensiones 2 x 2 x 4 m, con una llama existente desde el inicio de la simulación. Dicha llama, ubicada en el centro del dominio de cálculo, emite $\dot{q}_f = 200 kW$; tal y como se recoge en la Figura 5.14. Cabe apuntar que en dicha zona central no se resuelve el campo de temperaturas ni la cantidad de masa pirolizada, dado que la llama se impone directamente (es decir, no existe espesor de material).

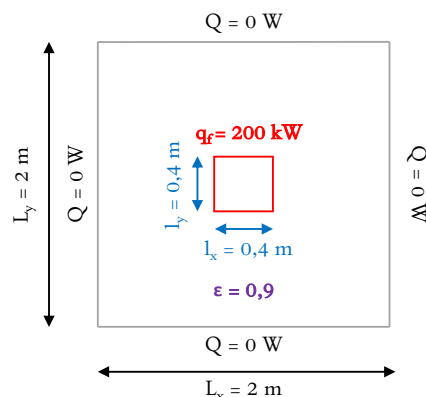


Figura 5.14: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Esquema ilustrativo de las condiciones de contorno.

En lo referente al **material** empleado, se definen la densidad, conductividad térmica, calor específico, temperatura de pirólisis, energía de vaporización, energía química, fracción de calor de radiación y energía de radiación del **polietileno de alta densidad**, cuyas propiedades se recogen en la Tabla 5.1. Por cuanto respecta a la **emisividad**, se asigna un valor igual a $\epsilon = 0,9$, al tratarse de un valor habitual para plásticos y espumas. Además, el **espesor** de la placa es igual a $0,001\text{ m}$ (1 mm), por lo que la **masa inicial** de material sólido es igual a $3,65\text{ kg}$.

Dado que el código CFD del Modelo #3 incluye tres enfoques posibles para el cálculo del flujo de calor emitido mediante radiación por la llama (ver Subsección 4.3.4 “Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama”), dicha validación se divide en dos partes:

1. **Estudio de independencia de malla.** En el modelo de FDS[®] se estudian diferentes tamaños de celda para el dominio de cálculo con objeto de converger el **calor incidente** sobre la materia sólida ($\dot{q}_{f,r,inc}$) durante la fase de calentamiento del material. Así mismo, se compara la evolución de la **temperatura media del dominio fuera de la llama** y el **instante de inicio de la pirólisis** de materia sólida.
2. **Estudio de independencia de discretización de llama.** Con la malla obtenida, se procede a analizar cada una de las variantes del “modelo de origen puntual” empleados para calcular la radiación de la llama en el código CFD del Modelo #3. Para ello, se estudia la convergencia del **calor incidente** sobre la materia sólida ($\dot{q}_{f,r,inc}$) en función de la discretización de la llama, comparándose los resultados obtenidos con respecto a la simulación convergida en FDS[®] para así determinar el error en cada uno de los modelados. Por último, se analiza la evolución temporal de la **temperatura media del dominio fuera de la llama** y el **instante de inicio de la pirólisis** de materia sólida.

5.5.1. Estudio de independencia de malla

Como se ha introducido anteriormente, dicho análisis se lleva a cabo en el modelo tridimensional de FDS[®]. Para ello, se estudian los siguientes **mallados Cartesianos cúbicos**:

1. **10 x 10 x 20 celdas**, con 2000 celdas de dimensiones iguales a $0,2 \times 0,2 \times 0,2\text{ m}$.
2. **20 x 20 x 40 celdas**, con 16000 celdas de dimensiones iguales a $0,1 \times 0,1 \times 0,1\text{ m}$.
3. **40 x 40 x 80 celdas**, con 128000 celdas de dimensiones iguales a $0,05 \times 0,05 \times 0,05\text{ m}$.
4. **80 x 80 x 160 celdas**, con 1024000 celdas de dimensiones iguales a $0,025 \times 0,025 \times 0,025\text{ m}$.

Además, para estos casos el **paso temporal empleado es de 0,05 s** para garantizar la convergencia del cálculo, mientras que el **tiempo de la simulación es de 200 s**; período suficiente para observar el calentamiento, pirólisis y combustión de la materia sólida circundante a la llama, si bien el estudio se centra en la fase de calentamiento para evaluar la misma llama en todos los casos (que será replicada en el Modelo #3 del código CFD). A continuación, se presentan los resultados obtenidos.

a) Calor incidente.

En primer lugar, se analiza el **calor incidente sobre el material sólido** durante la fase inicial de calentamiento. Cabe recordar que dicho flujo de calor proviene de la radiación emitida por la llama ubicada en el centro del dominio de cálculo. En este sentido, la Figura 5.15 recoge la evolución temporal del calor incidente en la zona exterior a la llama, la zona interior de la llama y la suma de ambas. En concreto, se estudia hasta el instante igual a 20 s, el cual es previo al inicio de la pirólisis del material sólido circundante a la llama.

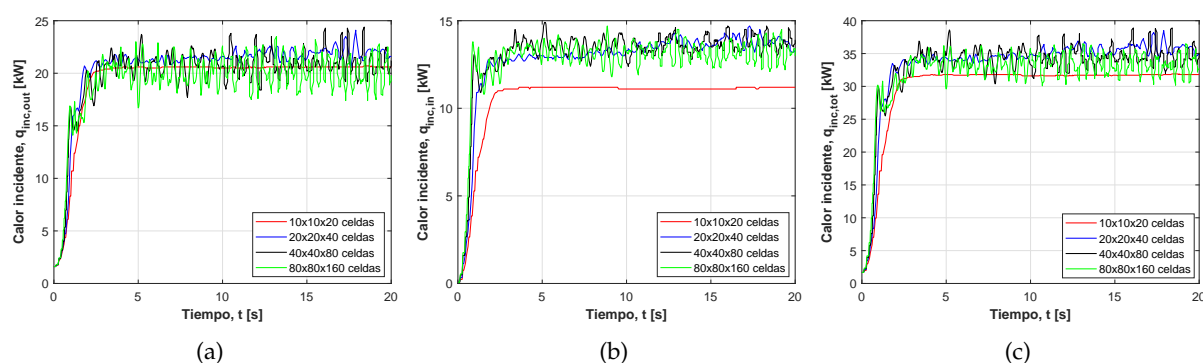


Figura 5.15: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para: (a) Calor incidente en el exterior de la llama, (b) Calor incidente en el interior de la llama, y (c) Calor incidente en todo el suelo del dominio.

Atendiendo a los resultados obtenidos en la Figura 5.15, se observa una fase inicial en la que la llama se establece (aproximadamente entre el instante 0 s y 3 s), alcanzándose posteriormente un valor estacionario de calor incidente. Sin embargo, a causa de las oscilaciones naturales de la llama, los resultados de las mallas más finas presentan fluctuaciones, motivo por el cual se analizan los valores medios y desviaciones estándar para el intervalo temporal entre 5 y 20 s en las Tablas 5.2, 5.3 y 5.4.

Calor incidente en el exterior de la llama, $\dot{q}_{f,r,inc,out}$				
Parámetro	10x10x20	20x20x40	40x40x80	80x80x160
Valor medio [kW]	20,58	21,71	20,93	20,48
Desviación estándar [kW]	0,05	0,56	1,15	1,45
Error [%]	0,5	6,0	2,2	-

Tabla 5.2: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para calor incidente en el exterior de la llama.

Calor incidente en el interior de la llama, $\dot{q}_{f,r,inc,in}$				
Parámetro	10x10x20	20x20x40	40x40x80	80x80x160
Valor medio [kW]	11,15	13,50	13,64	13,41
Desviación estándar [kW]	0,05	0,43	0,47	0,60
Error [%]	16,9	0,6	1,7	-

Tabla 5.3: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para calor incidente en el interior de la llama.

Calor incidente en todo el suelo, $\dot{q}_{f,r,inc,tot}$				
Parámetro	10x10x20	20x20x40	40x40x80	80x80x160
Valor medio [kW]	31,73	35,22	34,57	33,89
Desviación estándar [kW]	0,08	0,96	1,51	1,53
Error [%]	6,4	3,9	2,0	-

Tabla 5.4: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para calor incidente en todo el suelo.

b) Temperatura media e instante de inicio de pirólisis.

Además de analizar el calor incidente sobre el suelo en el interior y exterior de la llama, se estudia la evolución temporal de la temperatura media del dominio en el exterior de la llama, así como la masa sólida existente, tal y como se refleja gráficamente en la Figura 5.16. Los resultados muestran diferencias pequeñas para la temperatura media del dominio, mientras que existen desviaciones mayores en el instante de inicio de la pirólisis de la materia sólida.

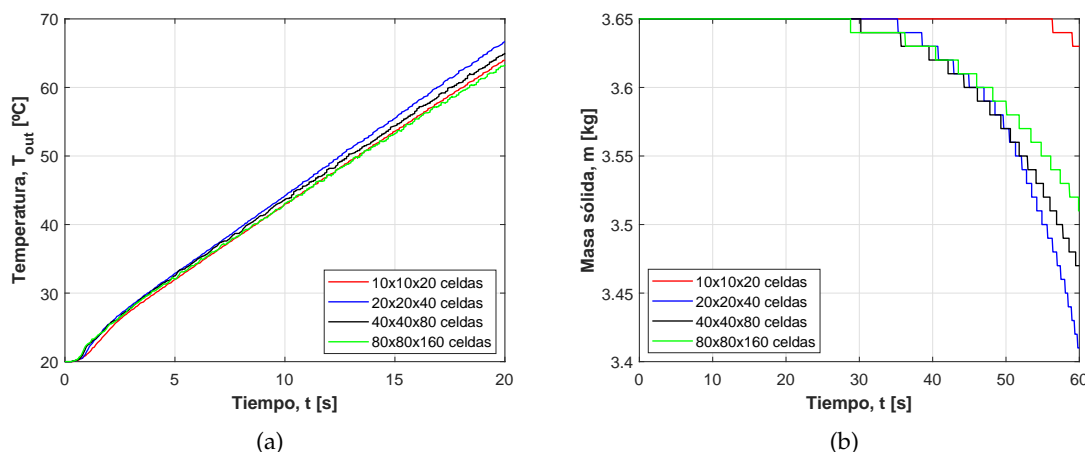


Figura 5.16: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para: (a) Temperatura media en el exterior de la llama, y (b) Masa sólida en el exterior de la llama.

Con tal de profundizar en este análisis, los datos concretos de la temperatura del dominio a los 20 s y el instante de inicio de la pirólisis se comparan en la Tabla 5.5.

Parámetro	10x10x20	20x20x40	40x40x80	80x80x160
Temperatura @ 20 s [°C]	65,0	66,7	64,9	64,6
Error [%]	1,3	5,2	1,1	-
Inicio Pirólisis [s]	56,4	35,2	30,2	29,4
Error [%]	95,8	22,2	4,9	-

Tabla 5.5: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de malla para temperatura media e instante de inicio de la pirólisis.

Atendiendo a todos los resultados expuestos, la **malla de 40 x 40 x 80 celdas se considera como independiente**, dado que ninguno de los parámetros estudiados exhibe una desviación mayor al 3 % con respecto a la malla más fina (80 x 80 x 160 celdas).

5.5.2. Estudio de independencia de discretización de llama

A partir de los resultados obtenidos en la subsección anterior, el **estudio de independencia de discretización de llama** para el Modelo #3 del código CFD se lleva a cabo para una **malla bidimensional de 40 x 40 celdas**. En lo que respecta al **paso temporal**, se fija en **1 s**, mientras que el **tiempo total** de la simulación es de **200 s**. Cabe apuntar que el código CFD desarrollado permite emplear pasos temporales más grandes sin perder estabilidad en el cálculo, de ahí que se opte por una discretización temporal 20 veces mayor a la empleada en FDS®.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para cada variante del modelado de la llama, los cuales se comparan con respecto a los valores proporcionados por la simulación de FDS®. Para ello, se estudian los **perfiles de calor incidente en la zona exterior de la llama**, así como la evolución de la **temperatura media del dominio** y el **instante de inicio de la pirólisis**.

a) Modelo del origen puntual.

En primer lugar, se analiza el **calor incidente sobre el material sólido** durante su fase de calentamiento, periodo en el cual el flujo de calor proviene de la radiación emitida por la llama ubicada en el centro del dominio de cálculo. De esta manera, la Figura 5.17 recoge el perfil del calor incidente en la zona exterior a la llama para $Y = 0,975\text{m}$, $Y = 0,775\text{m}$, e $Y = 0,275\text{m}$. En concreto, se estudian los valores promediados desde el instante 5 s (estabilización de la llama en FDS®) hasta el instante igual a 20 s (anterior al inicio de la pirólisis).

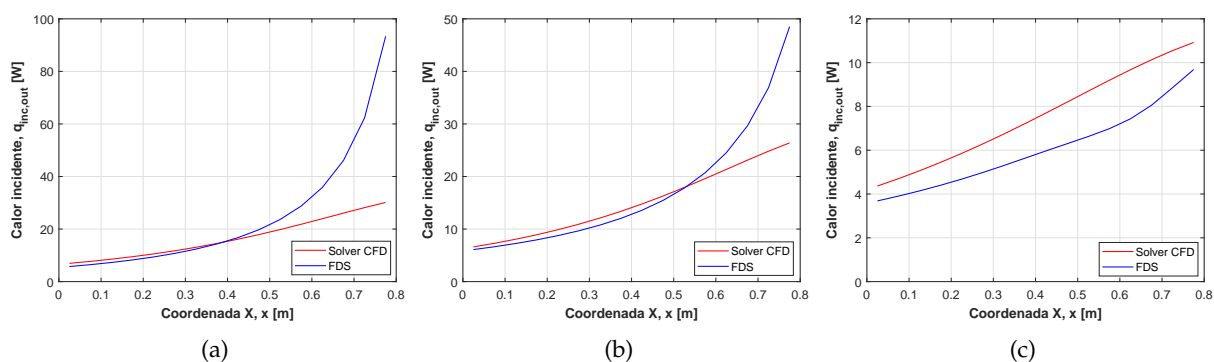


Figura 5.17: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio del calor incidente para el “modelo del origen puntual” en: (a) $Y = 0,975\text{m}$, (b) $Y = 0,775\text{m}$, y (c) $Y = 0,275\text{m}$.

En la Figura 5.17 se aprecian desviaciones importantes para las localizaciones más cercanas al frente de la llama, especialmente para los valores máximos de la coordenada X para los perfiles en $Y = 0,975$ m e $Y = 0,775$ m, donde el Modelo #3 (a) subestima notablemente el calor incidente con respecto a FDS®. Por otro lado, el comportamiento del calor incidente se captura mejor a medida que la zona de estudio se aleja de la llama, tal y como se puede observar para el perfil en $Y = 0,275$ m. Además, estas diferencias entre el “modelo del origen puntual” y la simulación de FDS® se resumen de forma gráfica en la Figura 5.18, donde se calcula el **ratio del calor incidente** proporcionado por FDS® y el Modelo #3 (a) del código CFD (ratio = $\dot{q}_{f,r,inc,FDS} / \dot{q}_{f,r,inc,CFD}$). En líneas generales, para posiciones $X < 0,5$ m, el ratio oscila entre 0,8 y 1,1 para las tres localizaciones analizadas, si bien el ratio se dispara hasta valores superiores a 3 a medida que el punto objetivo se acerca a la región de la llama.

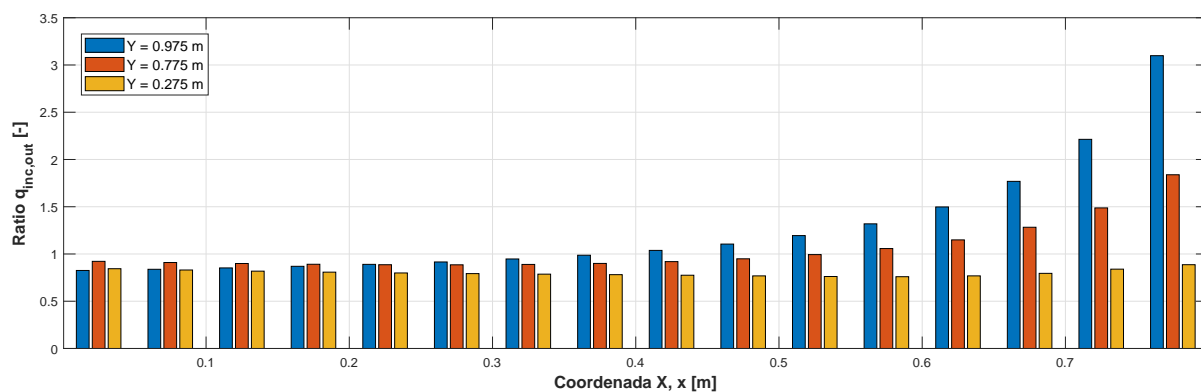


Figura 5.18: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Ratio del calor incidente para el “modelo del origen puntual”.

Además, para evaluar desde una perspectiva global la irradiancia de la llama, en la Tabla 5.6 se recogen **parámetros integrales del calor incidente**, los cuales se comparan con respecto a la simulación de FDS®. En este sentido, también se muestra la **temperatura media del dominio a los 20 s**, así como el **instante de inicio de la pirólisis**.

Parámetro	Modelo #3 (a)	FDS®	Error [%]
$\dot{q}_{f,r,inc,out}$ [kW]	18,14	20,93	13,3
$\dot{q}_{f,r,inc,in}$ [kW]	2,07	13,64	84,8
$\dot{q}_{f,r,inc,tot}$ [kW]	20,21	34,57	41,5
Temperatura @ 20 s [°C]	63,8	64,9	2,4
Inicio Pirólisis [s]	X	30,2	-

Tabla 5.6: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Análisis de los parámetros globales para el “modelo del origen puntual”.

Atendiendo a los resultados de la Tabla 5.6, tanto el calor en la zona exterior del dominio como su temperatura media se capturan con buena precisión. Sin embargo, las desviaciones vistas anteriormente para el calor incidente en la cercanía del frente de la llama impiden que se inicie la pirólisis del material circundante. En esta línea, el calor incidente en la zona interior a la llama es notablemente inferior al proporcionado por la simulación de FDS®, lo cual a su vez provoca una desviación cercana al 40 % para el calor incidente total.

b) Modelo del origen puntual con discretización en altura.

El “modelo del origen puntual con discretización en altura” exige, en primer lugar, un estudio de independencia del número de puntos ($n_{z,fire}$) a emplear en la discretización vertical de la llama. Para ello, se evalúan los calores incidentes sobre el dominio de cálculo de forma integral en la Tabla 5.7, cuyos resultados establecen que $n_{z,fire} = 32$ ofrece errores relativos menores al 2% tanto para la irradiancia interna y externa de la llama como total.

Parámetro	$n_{z,fire} = 2$	$n_{z,fire} = 4$	$n_{z,fire} = 8$	$n_{z,fire} = 16$	$n_{z,fire} = 32$	$n_{z,fire} = 64$
$\dot{q}_{f,r,inc,out}$ [kW]	18,01	16,72	16,16	16,04	16,01	16,00
Error [%]	12,56	4,50	1,00	0,25	0,06	-
$\dot{q}_{f,r,inc,in}$ [kW]	3,90	5,54	6,18	6,29	6,13	6,01
Error [%]	35,1	7,82	2,82	4,66	2,00	-
$\dot{q}_{f,r,inc,tot}$ [kW]	21,91	22,26	22,34	22,33	22,14	22,01
Error [%]	0,45	1,10	1,50	1,45	0,59	-

Tabla 5.7: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de discretización de llama para “modelo de origen puntual con discretización en altura”.

Una vez se ha determinado, el número de puntos a emplear en la discretización de la llama en altura ($n_{z,fire} = 32$), en la Figura 5.19 se procede a analizar el calor incidente sobre el material sólido durante su fase de calentamiento para los valores promedio entre 5 y 20 s en la zona exterior de la llama para las localizaciones $Y = 0,975\text{m}$, $Y = 0,775\text{ m}$, e $Y = 0,275\text{ m}$.

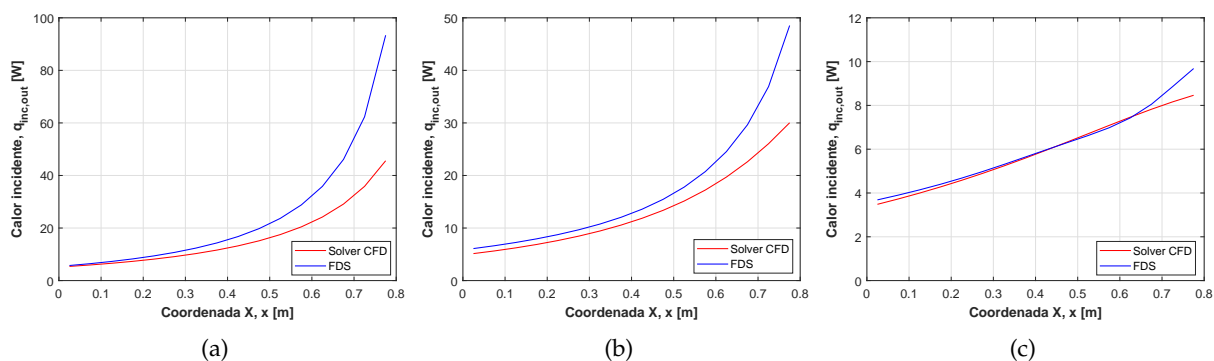


Figura 5.19: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio del calor incidente para el “modelo del origen puntual con discretización en altura” ($n_{z,fire} = 32$) en: (a) $Y = 0,975\text{ m}$, (b) $Y = 0,775\text{ m}$, y (c) $Y = 0,275\text{ m}$.

En la Figura 5.19 se observan de nuevo diferencias importantes para las localizaciones más cercanas al frente de la llama, si bien el “modelo del origen puntual con discretización en altura” sí es capaz de seguir levemente la tendencia exponencial que se produce en la cercanía de la llama en contraposición a lo obtenido con el Modelo #3 (a) que emplea el “modelo del origen puntual” para el cálculo de la radiación emitida por la llama. Pese a esto, se siguen subestimando los valores pico del calor incidente. Por otro lado, la tendencia para $Y = 0,275\text{ m}$ se captura de forma casi idéntica, al igual que sucede para los puntos más alejados de la llama en $Y = 0,975\text{ m}$ e $Y = 0,775\text{ m}$. Estas diferencias entre el “modelo del origen puntual con discretización en altura” y la simulación de FDS[®] se resumen de forma gráfica en la Figura 5.20, con ratios prácticamente siempre inferiores a 2 y valores medios entre 1 y 1,25.

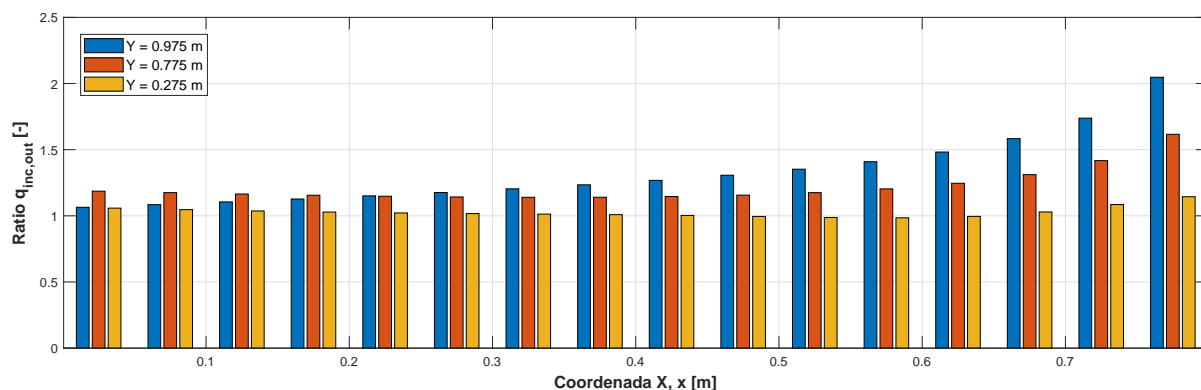


Figura 5.20: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Ratio del calor incidente para el “modelo del origen puntual con discretización en altura” ($n_{z,fire} = 32$).

Además, en la Tabla 5.8 se comparan los **parámetros integrales del calor incidente** con respecto a la simulación de FDS[®]. En este sentido, también se muestra la **temperatura media del dominio a los 20 s**, así como el **instante de inicio de la pirólisis**.

Parámetro	Modelo #3 (b)	FDS [®]	Error [%]
$q_{f,r,inc,out}$ [kW]	16,01	20,93	23,5
$q_{f,r,inc,in}$ [kW]	6,13	13,64	55,1
$q_{f,r,inc,tot}$ [kW]	22,14	34,57	36,0
Temperatura @ 20 s [°C]	58,7	64,9	13,9
Inicio Pirólisis [s]	64,0	30,2	111,9

Tabla 5.8: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Análisis de los parámetros globales para el “modelo del origen puntual con discretización en altura” ($n_{z,fire} = 32$).

Según la Tabla 5.8, tanto el calor en la zona exterior del dominio como su temperatura media se capturan con una precisión aceptable, si bien empeora con respecto al Modelo #3 (a) “modelo del origen puntual”. Sin embargo, en este caso el material circundante a la llama sí es capaz de pirolizar, aunque esta fase se alcanza con un desfase temporal superior al 100 %. Por último, el error del calor incidente en la zona interior de la llama se ha reducido considerablemente, de manera que el error del calor incidente total también ha disminuido.

c) Modelo del origen puntual con discretización en altura y base.

El “modelo del origen puntual con discretización en altura y base” exige, en primer lugar, un **estudio de independencia del número de puntos ($n_{x,fire}$, $n_{y,fire}$) a emplear en la discretización de la llama en su base** para una discretización en altura $n_{z,fire} = 32$. Para ello, se evalúan los calores incidentes sobre el dominio de cálculo de forma integral en la Tabla 5.9, cuyos resultados establecen que $n_{x,fire} = n_{y,fire} = 256$ ofrece errores relativos menores al 1 % tanto para la irradiancia interna y externa de la llama como total.

Una vez se ha determinado, el número de puntos a emplear en la discretización de la llama en su base ($n_{x,fire} = n_{y,fire} = 256$), en la Figura 5.21 se procede a analizar **el calor incidente sobre el material sólido** durante su fase de calentamiento para los valores promedio entre 5 y 20 s en la zona exterior de la llama para las localizaciones $Y = 0,975\text{m}$, $Y = 0,775\text{m}$, e $Y = 0,275\text{m}$.

Parámetro	$n_{x,fire} = 4$	$n_{x,fire} = 16$	$n_{x,fire} = 64$	$n_{x,fire} = 256$	$n_{x,fire} = 1024$
$\dot{q}_{f,r,inc,out}$ [kW]	16,61	16,83	16,91	16,93	16,94
Error [%]	1,95	0,65	0,18	0,06	-
$\dot{q}_{f,r,inc,in}$ [kW]	5,42	5,17	5,83	5,28	5,29
Error [%]	2,45	2,26	10,2	0,19	-
$\dot{q}_{f,r,inc,tot}$ [kW]	22,03	22,00	22,74	22,21	22,23
Error [%]	0,90	1,03	2,29	0,09	-

Tabla 5.9: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio de independencia de discretización de llama para “modelo de origen puntual con discretización en altura y base”.

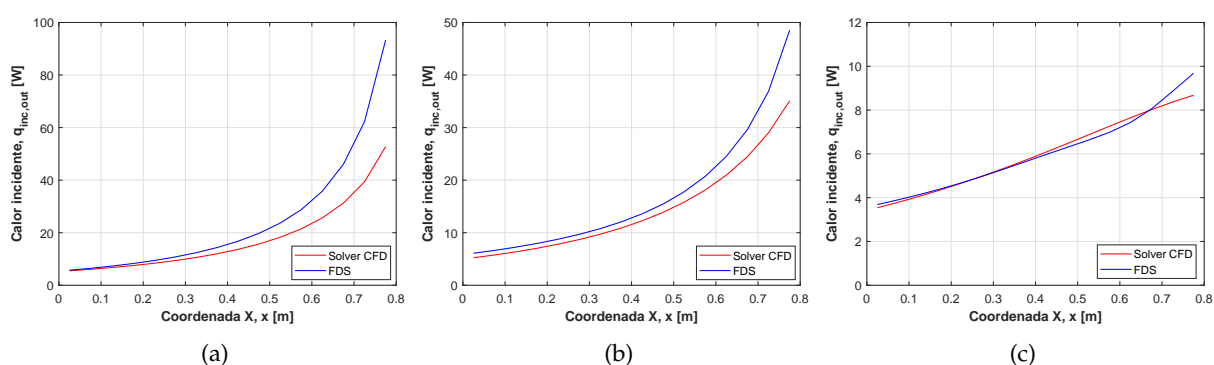


Figura 5.21: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Estudio del calor incidente para el “modelo del origen puntual con discretización en altura y base” ($n_{x,fire} = n_{y,fire} = 64$) en: (a) $Y = 0,975$ m, (b) $Y = 0,775$ m, y (c) $Y = 0,275$ m.

En la Figura 5.21 se observan de nuevo diferencias importantes para las localizaciones más cercanas al frente de la llama, si bien el “modelo del origen puntual con discretización en altura y base” es capaz de seguir levemente la tendencia exponencial que se produce en la cercanía de la llama. Así mismo, en la zona inmediatamente adyacente a la llama se consigue una ligera mejora con respecto al Modelo #3 (b). Pese a todo, se siguen subestimando los valores pico del calor incidente. Por otro lado, la tendencia para $Y = 0,275$ m se captura de forma casi idéntica, al igual que sucede para los puntos más alejados de la llama en $Y = 0,975$ m e $Y = 0,775$ m. Estas diferencias entre el “modelo del origen puntual con discretización en altura y base” y la simulación de FDS[®] se resumen de forma gráfica en la Figura 5.22, con ratios siempre inferiores a 1,8 y valores medios entre 0,95 y 1,15.

Además, en la Tabla 5.10 se comparan los **parámetros integrales del calor incidente** con respecto a la simulación de FDS[®]. En este sentido, también se muestra la **temperatura media del dominio a los 20 s**, así como el **instante de inicio de la pirólisis**. Atendiendo a estos resultados, la precisión ha aumentado ligeramente con respecto del “Modelo #3 (b)”, capturándose con mayor fidelidad el calor incidente sobre el dominio de cálculo externo a la llama, así como su temperatura media e instante de inicio de la pirólisis. Pese a ello, los errores relativos de algunos parámetros siguen siendo notables, como sucede con el instante de inicio de pirólisis, calor incidente en la zona de la llama y, en consecuencia, el calor incidente en todo el dominio.

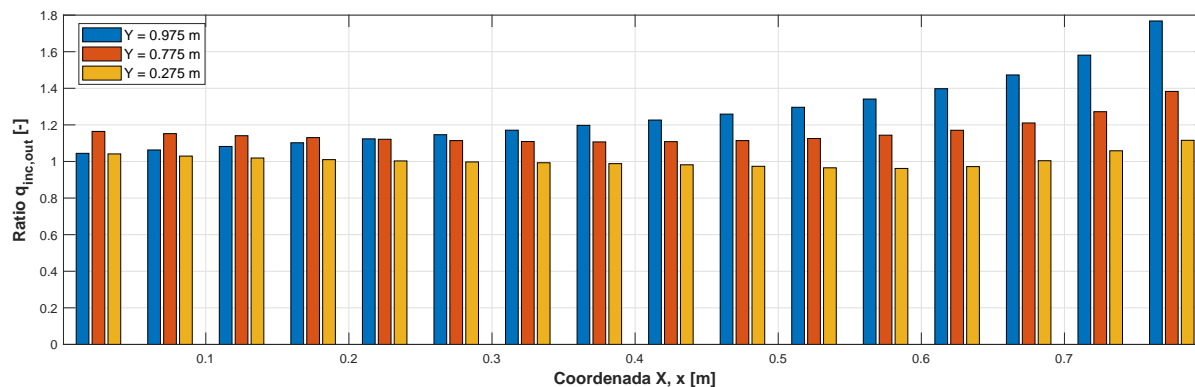


Figura 5.22: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Ratio del calor incidente para el “modelo del origen puntual con discretización en altura y base” ($n_{x,fire} = n_{y,fire} = 256$).

Parámetro	Modelo #3 (c)	FDS®	Error [%]
$q_{f,r,inc,out}$ [kW]	16,93	20,93	19,1
$q_{f,r,inc,in}$ [kW]	5,28	13,64	61,3
$q_{f,r,inc,tot}$ [kW]	22,21	34,57	35,8
Temperatura @ 20 s [°C]	59,0	64,9	9,1
Inicio Pirólisis [s]	54,0	30,2	78,8

Tabla 5.10: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Análisis de los parámetros globales para el “modelo del origen puntual con discretización en altura y base” ($n_{x,fire} = n_{y,fire} = 256$).

5.5.3. Comparativa de los submodelos de llama

Tras analizar los tres submodelos de llama, en la Tabla 5.11 se recoge una comparativa de las variables de interés, así como de los tiempos de cálculo de cada submodelo con respecto de la simulación de FDS®. En ella, puede apreciarse que el tiempo de cálculo del “Modelo #3 (c)” es incluso superior al del programa de simulación FDS®, de manera que la leve ventaja de precisión con respecto al “Modelo #3 (b)” no justifica su elevado coste computacional. Cabe apuntar que las simulaciones se lanzan en un ordenador con procesador i7-6700HQ 2,6 GHz con 4 núcleos (8 procesadores lógicos) y 16 GB de memoria RAM.

Parámetro	Modelo #3 (a)	Modelo #3 (b)	Modelo #3 (c)	FDS®
$q_{f,r,inc,out}$ [kW]	18,14	16,01	16,93	20,93
$q_{f,r,inc,in}$ [kW]	2,07	6,13	5,28	13,64
$q_{f,r,inc,tot}$ [kW]	20,21	22,14	22,21	34,57
Temperatura @ 20 s [°C]	63,8	58,7	59,0	64,9
Inicio Pirólisis [s]	X	64,0	54,00	30,2
Tiempo Cálculo [h]	0,04	0,17	13,3	8,9

Tabla 5.11: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Comparativa entre los submodelos de llama.

Por último, para cerrar este capítulo, se recogen algunos contornos proporcionados por la simulación de FDS[®], los cuales se extraen a través del programa de post-proceso SmokeView[®]. En particular, la Figura 5.23 muestra la forma de la llama y la temperatura del suelo para el caso convergido de 40x40x80 celdas durante la fase de calentamiento.

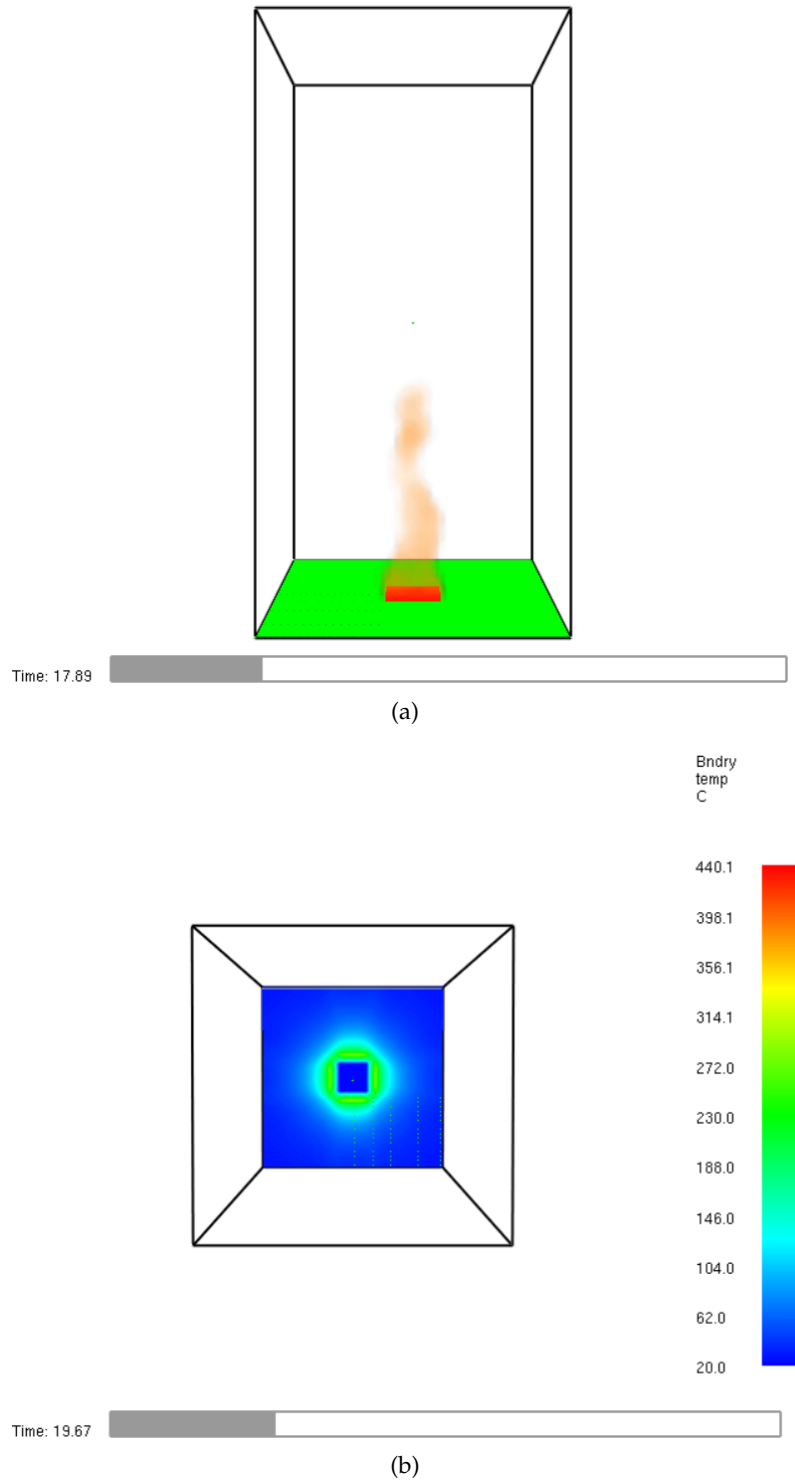


Figura 5.23: Modelo #3 - Pirólisis, Emisividad y Radiación de la llama - Contornos de la simulación FDS[®] para: (a) Forma de la llama, y (b) Temperatura del suelo.

Capítulo 6

Conclusiones y desarrollos futuros

Por último, para cerrar con la memoria del Trabajo Final de Máster presentado, se procede a exponer las principales conclusiones extraídas a raíz de la consecución de un **modelo CFD simplificado para el cálculo de la combustión de un material sólido**. Así mismo, se presentan los desarrollos a futuro que nacen de las bases sentadas hasta el momento.

6.1. Conclusiones

El presente Trabajo Final de Máster, titulado como “Desarrollo y validación de herramientas numéricas para cálculos de carga de fuego”, puede desglosarse en dos etapas fundamentalmente. La primera, de carácter teórico, se ha centrado en la comprensión y modelado de los fenómenos físicos implicados en el proceso de combustión de un material sólido, mientras que en la segunda, puramente computacional, se ha desarrollado, desde cero, y validado un código de simulación CFD para predecir la dinámica de su combustión. En este sentido, la elaboración de este proyecto ha dado lugar a las siguientes conclusiones:

- Durante la caracterización teórica de la física involucrada en la combustión de la materia sólida, se ha comprendido la **complejidad** del problema abordado, el cual involucra a la **fluidodinámica**, la **transferencia de masa y calor**, la **termodinámica** y las **reacciones químicas de pirólisis y combustión**. En esta línea, cabe apuntar la gran cantidad de escenarios y variables a considerar que se han descrito: estudio microscópico o macroscópico, material térmicamente delgado o grueso, encendido provocado o auto-encendido, combustión con llama o latente, combustión libre o controlada por ventilación, flujos radiativos y/o convectivos de la llama, etc. Por ello, con tal de acotar el estudio, el trabajo se ha centrado en el **enfoque macróscopico o energético bajo las hipótesis de material térmicamente delgado, combustión con llama, auto-encendido y con combustión libre (exceso de oxidante)**.
- Sobre las hipótesis de modelado anteriormente mencionadas, se ha desarrollado un código CFD simplificado encargado de resolver la combustión de un material sólido. Para ello, se resuelve la Ecuación de la Energía Térmica, compuesta por los términos transitorio, difusivo y fuente, para un dominio bidimensional. La dificultad del código ha aumentado gradualmente a través del modelado del término fuente, el cual puede contar con las contribuciones de una fuente de energía externa, la emisividad del material, la radiación de la llama y la energía invertida en pirolizar la materia sólida.

- El código CFD se ha validado a medida que se añadían contribuciones al término fuente de la Ecuación de la Energía Térmica. De esta forma, se ha podido comprobar que los efectos conductivos se reproducen perfectamente, mientras que la pirólisis y la emisividad del material sólido también se han modelado correctamente pese a las leves diferencias existentes con respecto al programa FDS[®] en la determinación de la temperatura de inicio de la pirólisis. Por otro lado, el cálculo de la radiación emitida por la llama ha supuesto un verdadero reto, de manera que se han planteado tres submodelados diferentes. Si bien la precisión de la solución final obtenida no es la ideal, la velocidad del modelo supone una reducción sustancial del coste computacional.
- Con todo ello, se ha configurado un **modelo CFD simplificado para el cálculo de la combustión de un material sólido** bajo unas ciertas condiciones (hipótesis). Si bien, tal y como se ha comentado en el punto anterior, la precisión obtenida no es elevada, esta herramienta permite obtener estimaciones rápidas y aproximadas de la curva de carga de fuego de un material sólido mediante la resolución de una única ecuación (Ecuación de conservación de la Energía Térmica en un dominio bidimensional).
- Finalmente, este trabajo ha permitido ahondar en los conocimientos de la Mecánica de Fluidos Computacional aplicada al campo de la combustión, así como profundizar en la utilización de herramientas tan diversas como lenguajes de programación (Python[®]), programas comerciales de simulación fluidodinámica (ANSYS Fluent[®]) y programas libres de simulación de combustión (FDS[®]). Con todo ello, se marca el punto y final a mis estudios en el Máster de Mecánica de Fluidos Computacional.

6.2. Desarrollos futuros

Las bases sentadas con el presente Trabajo Final de Máster representan un punto de partida para continuar con algunos de los desarrollos futuros listados a continuación:

- Ampliación del código CFD para considerar escenarios no estudiados: convección de la llama (penacho) y materiales térmicamente gruesos. Este último caso requiere de la configuración de un dominio de cálculo tridimensional, dado que el campo de temperaturas ya no es uniforme a lo largo del espesor del material sólido.
- Mejorar el modelado de la radiación de llama mediante la introducción de una distribución vertical de la irradiancia no uniforme.
- Implementación del enfoque microscópico para estudiar las emisiones de gases contaminantes (dióxido de carbono, hollín, monóxido de carbono, NO_x, etc)
- Optimización del estilo de programación del código para reducir su coste computacional.

Bibliografía

- [1] Curiosfera. Historia del fuego: origen y descubrimiento (2020). <https://curiosfera-historia.com/historia-del-fuego/>
- [2] AEOT. Protección Contra Incendios (2022). <https://www.aeot.es/proteccion-contra-incendios/>
- [3] Gobierno de Aragón. Seguridad Industrial. Protección contra incendios (-). <https://www.aragon.es/-/proteccion-contra-incendios>
- [4] AENOR. UNE-EN 45545-2:2013 + A1:2016 (2016). <https://tienda.aenor.com/norma-une-en-45545-2-2013-a1-2016-n0056018>
- [5] Haack, A. (1999). Fire Protection in Traffic Tunnels: General Aspects and Results of the EUREKA Project. *Tunnelling and Underground Space Technology*, Vol. 13, N°4, pp. 377-381.
- [6] Ingason, H. (2008). Design fire curves for tunnels. *Fire Safety Journal* 44: pp. 259-265.
- [7] Creta, F. *Combustion course. Lecture notes - The main definitions of Combustion*. Laurea Magistrale in Ingegneria Aeronautica. Sapienza Università di Roma. Roma (2019).
- [8] Ali S. Rangwala. *Chapter 11 - Thermal Decomposition of Polymeric Materials*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [9] Artur Witkowski, Anna A. Stec and T. Richard Hull. *Chapter 7 - Thermal Decomposition of Polymeric Materials*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [10] Fire Dynamics Simulator. Technical Reference Guide (Version 4) Edition. *NIST Special Publication 1018*, 2006.
- [11] Guillermo Rein. *Chapter 19 - Smouldering Combustion*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [12] Fire Dynamics Simulator. Fire Dynamics Simulator User's Guide Sixth Edition. *NIST Special Publication 1019*, 2013.
- [13] Gregory T. Linteris and John F. Griffiths. *Chapter 10 - Chemical kinetics and Fire*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [14] José Torero. *Chapter 21 - Flaming Combustion of Solid Fuels*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.

- [15] Yuji Hasemi. *Chapter 23 - Surface Flame Spread*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [16] D.D. Drysdale. *Chapter 5 - Thermochemistry*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [17] Mohammed M. Khan, Archibald Tewarson and Marcos Chaos. *Chapter 36 - Combustion Characteristics and Generation of Fire Products*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [18] Brian Y. Lattimer. *Chapter 25 - Heat Transfer from Fires to Surfaces*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [19] Gunnar Heskestad. *Chapter 13 - Fire Plumes, Fire Height and Air Entrainment*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [20] Daniel T. Gottuk and Brian Y. Lattimer. *Chapter 16 - Effect of Combustion Conditions on Species Production*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [21] Haack, A. (1998). Fire Protection in Traffic Tunnels: General Aspects and Results of the EUREKA Project. *Tunnelling and Underground Space Technology*, Vol. 13, N^o4, pp. 377-381.
- [22] METRO. The METRO Project 2009-2012. <http://www.metroproject.se/>
- [23] Antonio Hospitaler Pérez. TRABAJO FINAL DE MÁSTER. *Diseño prestacional de túneles en situación de incendio. Modelos FDS. Aplicación a un túnel de metro* (Máster Universitario en Construcciones e instalaciones industriales). Universitat Politècnica de València. Valencia (2016).
- [24] NIST. Cone Calorimeter (2021). <https://www.nist.gov/laboratories/tools-instruments/cone-calorimeter>
- [25] M. Fontana, J. Kohler, K. Fisher and G. De Sanctis. *Chapter 35 - Fire Load Density*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [26] Ingason, H. and Zhen Li, Y. (2015). A New Methodology of Design Fires for Train Carriages Based on Exponential Curve Method. *Fire Technology*, 52, pp. 1449-1464.
- [27] TRStrab Brandschutz (2014). *Technische Regeln für Straßenbahnen Brandschutz in unterirdischen Betriebsanlagen*.
- [28] FireFOAM Wiki (2021). *FireFOAM*. <https://openfoamwiki.net/index.php/FireFoam>
- [29] F. Moukalled, L. Mangani and M. Darwish. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics. An Advanced Introduction with OpenFOAM[®] and Matlab[®]*. Springer Books. ISBN: 978-3-319-16873-9
- [30] Gil Mejías, A. *Mecánica de Fluidos Computacional y Experimental. Unidad 0 - Introducción pre-proceso*. Máster en Ingeniería Aeronáutica. Universitat Politècnica de València. Valencia (2020).

-
- [31] Wikipedia. Python (2023). <https://es.wikipedia.org/wiki/Python>
- [32] NIST. FDS and Smokeview (2021). <https://www.nist.gov/services-resources/software/fds-and-smokeview>
- [33] Locallux. 4 Leyes principales de la radiación (2023). <https://es.triangleinnovationhub.com/4-main-laws-radiation>.
- [34] Gunnar Heskestad. *Chapter 13 - Fire Plumes, Fire Height and Air Entrainment*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [35] M. Hurley. *Appendix 2 - Thermophysical Property Data*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. Springer, 5th Edition, 2016. ISBN: 978-1-4939-2564-3.
- [36] Michel Rieutord. *Fluid Dynamics. An introduction*. Springer Books. ISBN: 978-3-319-09351-2
- [37] Martí Gómez-Aldaraví, P. *Ampliación de Mecánica de Fluidos. Unidad 4 - Turbulencia*. Grado en Ingeniería Aeroespacial. Universitat Politècnica de València. Valencia (2017).
- [38] Wikipedia. Teorema π de Vaschy-Buckingham (2019). https://es.wikipedia.org/wiki/Teorema_%CF%80_de_Vaschy-Buckingham
- [39] Vicente Dolz, Sergio Hoyas, Benjamín Pla and Pablo Fajardo. *Mecánica de Fluidos*. Editorial Universitat Politècnica de València, 2012.
- [40] CFD Online. Spalart-Allmaras model (2015). https://www.cfd-online.com/Wiki/Spalart-Allmaras_model
- [41] CFD Online. Standard $k - \epsilon$ model (2014). https://www.cfd-online.com/Wiki/Standard_k-epsilon_model
- [42] CFD Online. SST $k - \omega$ model (2011). https://www.cfd-online.com/Wiki/SST_k-omega_model
- [43] Kuzmin, D. and Mierka, O. On the implementation of the $k - \epsilon$ turbulence model in incompressible flow solvers based on a finite element discretization. . Institute of Applied Mathematics (LS III), University of Dortmund, 2006.
- [44] CFD Online. Nonlinear eddy viscosity models (2009). https://www.cfd-online.com/Wiki/Nonlinear_eddy_viscosity_models
- [45] CFD Online. Reynolds Stress Model (2017). [https://www.cfd-online.com/Wiki/Reynolds_stress_model_\(RSM\)](https://www.cfd-online.com/Wiki/Reynolds_stress_model_(RSM))
- [46] Wikipedia. Número de Courant-Friedrichs-Levy (2019). https://es.wikipedia.org/wiki/N%C3%BAmero_de_Courant-Friedrichs-Levy
- [47] OpenFOAM: User Guide v2006. Cube-root volume (2016). <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-turbulence-les-delta-cuberootvol.html>
- [48] J. Smagorinsky. General Circulation Experiments With The Primitive Equations. 91(3), 1963.

- [49] An Internet Book on Fluid Dynamics. Law of the wall (undated). <http://brennen.caltech.edu/fluidbook/basicfluiddynamics/turbulence/lawofthewall.pdf>
- [50] Wikipedia. Law of the wall (2020). https://en.wikipedia.org/wiki/Law_of_the_wall
- [51] CFD Online. Law of the wall (2011). https://www.cfd-online.com/Wiki/Law_of_the_wall
- [52] Youtube. Fluid Mechanics 101. [CFD] What are Wall Functions and How do they work? <https://www.youtube.com/watch?v=fJDYtEGMgzs>
- [53] LEAP Australia. What y^+ should I use? (2020). https://www.computationalfluiddynamics.com.au/y-plus_part1_understanding-the-physics-of-boundary-layers/
- [54] CFD Online. Near-wall treatment for LES models (2006). https://www.cfd-online.com/Wiki/Near-wall_treatment_for_LES_models

Anexo I. Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos

En este anexo se exponen las ecuaciones fundamentales de la Mecánica de Fluidos. En concreto, se recogen sus ecuaciones generales en términos de leyes de conservación de la masa, cantidad de movimiento, energía y especies. Tras ello, se introducen los aspectos más relevantes acerca del modelado de la turbulencia, cuyo tratamiento es esencial en los problemas fluidodinámicos.

I.1. Ecuaciones generales

La forma diferencial de las ecuaciones generales de la Mecánica de Fluidos queda definida a partir de la estructura marcada por la denominada como **Ecuación general de transporte**, derivada a partir del Teorema de Transporte de Reynolds (en forma integral). Dicha ecuación está compuesta por un término temporal, un término convectivo, un término difusivo y un término fuente, que recoge las contribuciones restantes; tal y como se muestra en la Ecuación (I.1.1).

$$\frac{\partial(\rho \cdot \phi)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \cdot \phi \cdot \vec{u}) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma_\phi \vec{\nabla}(\phi)) + S_\phi \quad (\text{I.1.1})$$

donde:

- ϕ representa la variable de estudio.
- $\frac{\partial(\rho \cdot \phi)}{\partial t}$ es el término temporal o acumulativo.
- $\vec{\nabla} \cdot (\rho \cdot \phi \cdot \vec{u})$ es el término convectivo, gobernado por el campo de velocidades $\vec{u} = (u, v, w)$.
- $\vec{\nabla} \cdot (\Gamma_\phi \vec{\nabla}(\phi))$ es el término difusivo o de disipación, siendo Γ_ϕ la constante de difusividad.
- S_ϕ es el término fuente, el cual recoge las contribuciones restantes a la ecuación de transporte.

Ecuación de la conservación de la masa

La **ecuación de la conservación de la masa**, también conocida como ecuación de la continuidad, se deduce a partir de la ecuación general de transporte para $\phi = 1$. Es decir,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \cdot \vec{u}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (\text{I.1.2})$$

Los términos de la Ecuación (I.1.2) son, de izquierda a derecha, los siguientes:

1. Evolución temporal de la densidad (ρ), es decir, de la masa por unidad de volumen. Representa el término acumulativo del gasto másico sobre un volumen de control, el cual es nulo en problemas estacionarios o flujo incompresible, donde ρ permanece invariante con el tiempo.
2. Término convectivo, que representa el flujo másico neto entrante/saliente a través de las fronteras del volumen de control considerado.

Notar que el término fuente S_ϕ es nulo para la ecuación de la conservación de la masa, dado que el término acumulativo del gasto másico se compensa con los flujos másicos a través de las fronteras para un determinado volumen fluido.

Ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento o momento lineal

La **ecuación de conservación de la cantidad de movimiento**, también denominado como conservación del momento lineal, se fundamenta en la segunda ley de Newton. Según esta, la variación de la cantidad de movimiento de un elemento fluido es equivalente a la fuerza neta que actúa sobre el mismo, lo cual se traduce en la Ecuación (I.1.3).

$$\frac{D(\rho\vec{u})}{Dt} = \vec{\nabla} \cdot \tau + \rho \cdot \vec{f}_m \quad (\text{I.1.3})$$

donde:

- τ representa el tensor de esfuerzos, compuesto por el tensor (isotrópico) de presiones ($-p \cdot \delta_{ij}$, donde δ_{ij} es la delta de Kronecker) y el tensor (anisotrópico) viscoso (τ'_{ij}).

$$\tau = \tau_{ij} = -p \cdot \delta_{ij} + \tau'_{ij} \quad (\text{I.1.4})$$

- $\rho \cdot \vec{f}_m$ constituyen las fuerzas volumétricas que actúan sobre el volumen fluido, tales como las debidas a la aceleración de la gravedad.

Introduciendo la ley de Navier-Poisson, válida para fluidos con comportamiento newtoniano, el tensor de esfuerzos viscosos τ'_{ij} es proporcional al tensor de deformaciones. Empleando la notación de Einstein, τ'_{ij} se formula de acuerdo con la Ecuación (I.1.5).

$$\tau'_{ij} = \underbrace{\mu \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)}_{2 \cdot S_{ij}} + \left[\left(\mu_v - \frac{2\mu}{3} \right) \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] \cdot \delta_{ij} \quad (\text{I.1.5})$$

donde μ_v es la viscosidad volumétrica, igual a 0 para gases monoatómicos, y S_{ij} es el tensor de deformaciones.

Por tanto, la ecuación de la cantidad de movimiento se formula según la Ecuación (I.1.6).

$$\frac{D(\rho\vec{u})}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left[\left(\mu_v - \frac{2\mu}{3} \right) \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_k} - p \right] \cdot \delta_{ij} \right) + \rho \cdot \vec{f}_m \quad (\text{I.1.6})$$

Además, esta expresión puede desarrollarse y reescribirse de una forma equivalente a la ecuación general de transporte para $\phi = \vec{u}$.

$$\frac{D(\rho\vec{u})}{Dt} = \frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{u}\vec{u}) = -\vec{\nabla}(p) + \vec{\nabla} \cdot (\mu \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{u}) + \vec{S}_M \quad (\text{I.1.7})$$

donde el término temporal y convectivo se agrupan a partir de la derivada total (D/Dt); $\vec{\nabla}(p)$ es el tensor de presiones; $\vec{\nabla} \cdot (\mu \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{u})$ es el término difusivo, siendo μ la constante de difusividad; y el término fuente \vec{S}_M contiene las contribuciones restantes del tensor viscoso τ'_{ij} , así como las fuerzas másicas, (e.g. la gravedad o la aceleración de Coriolis) y las fuerzas superficiales (e.g. la tensión superficial).

Cabe apuntar que la ecuación de conservación de movimiento es una ecuación vectorial que se expande para cada una de las componentes del campo de velocidades \vec{u} .

Ecuación de la conservación de la energía

La **ecuación de conservación de la energía**, derivada a partir del primer principio de la termodinámica, establece que la variación de energía interna E de un sistema cerrado equivale a la diferencia entre la cantidad de calor suministrado al sistema y el trabajo realizado por el mismo sobre el entorno. Asignando $\phi = E$ en la ecuación general del transporte, puede escribirse la ecuación de la energía según la Ecuación (I.1.8).

$$\rho \cdot \frac{DE}{Dt} = -p \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) + \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T)) + \phi_v + Q + S_E \quad (\text{I.1.8})$$

donde:

- E es la energía interna del fluido.
- $\vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla}(T))$ es el término difusivo de la ecuación, determinado por la conducción de calor a través del coeficiente de transmisión de calor k ponderado por el gradiente de temperaturas $\vec{\nabla}(T)$.
- ϕ_v es la función de disipación de Rayleigh definida por la Ecuación (I.1.9), la cual representa el calor generado por la disipación del trabajo de las fuerzas de fricción (proporcional a la viscosidad molecular μ y al cuadrado de la rapidez de deformación).

$$\phi_v = \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \cdot \left[\mu \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\mu_v - \frac{2\mu}{3} \right) \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \cdot \delta_{ij} \right] \quad (\text{I.1.9})$$

- Q representa cualquier fuente de calor, ya sea externa (radiación o flujo de calor conocido) o interna (reacción de combustión).
- S_E es el término fuente, medido en energía por unidad de volumen y tiempo, donde se engloba, por ejemplo, el trabajo realizado por la fuerza gravitacional.

Ecuación de conservación de especies

La **ecuación de conservación de especies** consiste en el balance entre la acumulación, emisión y producción de masa de las mismas. En este sentido, su expresión se deriva a partir de la ecuación general de transporte para $\phi = Y_i$, siendo Y_i la fracción másica de la especie "i". Esta se define como $Y_i = m_i/m = \rho_i/\rho$; donde m y ρ son la masa y densidad de la mezcla formada por n especies, mientras que m_i y ρ_i son la masa y densidad de la especie "i".

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_i \vec{u}) = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla}(Y_i)) + S_i \quad (\text{I.1.10})$$

Los términos de la ecuación de conservación de especies son, de izquierda a derecha, los siguientes:

1. Término no estacionario que representa la rapidez neta de acumulación de la especie "i".
2. Transporte convectivo o emisión neta de la masa de la especie "i" a causa del campo de velocidades \vec{u} .
3. Término difusivo que considera la emisión de masa debido a los gradientes de concentración de la especie "i" a través del coeficiente de difusión de masa molecular D . Este se define como el ratio de la viscosidad molecular de la especie y el número de Schmidt ($D = \mu_i / Sc$).
4. Representa el término fuente o sumidero de la especie "i", debido a reacciones químicas u otros fenómenos.

Por tanto, si se cuenta con n especies en el sistema, deben plantearse n ecuaciones de conservación de las especies; de manera que cada especie lleva asociada su propia ecuación. Sin embargo, la ecuación de compatibilidad dada por el resultado unitario del sumatorio de las fracciones másicas, permite prescindir de una ecuación de conservación de las especies. Su expresión se recoge en la Ecuación (I.1.11).

$$\sum_{i=1}^n Y_i = 1 \quad (\text{I.1.11})$$

I.2. Modelado de la turbulencia

La selección del modelo de turbulencia requiere especial atención, dada la complejidad asociada a los fenómenos turbulentos. De hecho, la comprensión de los mecanismos de la turbulencia todavía constituye uno de los desafíos actuales en el campo de la física [36]. A continuación, se presentan sus principales características y los enfoques computacionales empleados para su modelado.

I.2.1. Introducción a la turbulencia

La **turbulencia** no es una propiedad del fluido (como la densidad o la viscosidad), sino un estado del flujo. Por ello, no depende de su origen y se caracteriza por variaciones rápidas y caóticas de las propiedades fluidas, tales como la presión o la velocidad. En consecuencia, los flujos turbulentos son no estacionarios, además de rotacionales, altamente difusivos y disipativos.

La aparición de estructuras rotacionales inestables de diferentes tamaños que interactúan entre sí en el seno del flujo turbulento, conocidas como remolinos o *eddies*, convierte la turbulencia en un fenómeno tridimensional caracterizado por su elevada vorticidad. Como consecuencia, este estado del flujo es altamente difusivo, favoreciendo la homogeneización o mezcla de fluidos, así como el intercambio de masa, cantidad de movimiento y calor entre las partículas fluidas. Por tanto, el fenómeno de la turbulencia es inherente al proceso de combustión, y su correcto tratamiento es esencial para obtener resultados fieles a la realidad.

En relación al carácter difusivo del flujo turbulento, esta última característica se corresponde con la definición de Richardson para la turbulencia: “Los remolinos grandes están compuestos por remolinos pequeños que se alimentan de su velocidad, y estos últimos están formados por remolinos más pequeños y así hasta alcanzar los efectos viscosos”. Por tanto, la turbulencia está constituida por una producción inicial de energía, que se transfiere mediante la rotura de los vórtices grandes e inestables en vórtices más pequeños hasta que la viscosidad disipa completamente los *eddies* de menor tamaño. Este fenómeno, conocido como **cascada de energía**, describe la transferencia de energía entre las diferentes escalas longitudinales de la turbulencia.

Las escalas características de las estructuras turbulentas se listan a continuación [37]:

- **Escala integral** (L_0). La turbulencia se desarrolla a partir de la inestabilidad de los flujos laminares por encima de un cierto número de Reynolds, denominado *número de Reynolds crítico*, cuyo valor depende del problema de estudio. La teoría de la turbulencia más extendida es el modelo de la cascada de energía de Kolmogorov, la cual establece un transporte de energía turbulenta desde el flujo medio a los remolinos de mayor tamaño. Estos *eddies* se caracterizan por la presencia de escalas longitudinales del mismo orden de magnitud que las escalas propias del flujo medio (o del problema, L_{ref}). Dichas escalas poseen un elevado grado de anisotropía y fluctuaciones de frecuencia reducida. Así que, atendiendo a todo lo expuesto:

$$L_{ref} \sim L_0 \quad ; \quad Re_0 \gg 1 \quad (I.2.1)$$

- **Escala de Taylor** (λ). Los vórtices pueden interpretarse como un movimiento rotatorio local, cuya dimensión característica es la escala local de la turbulencia. Los *eddies* se solapan en el espacio, donde los remolinos de mayor tamaño contienen a los de menor escala. A medida que la turbulencia se disipa, su energía cinética se transfiere desde los vórtices grandes a los pequeños; siendo, por tanto, necesario definir una escala intermedia. En la escala de Taylor, los efectos inerciales y viscosos son aproximadamente del mismo orden de magnitud, lo que deriva en la siguiente definición:

$$\frac{\lambda}{L_0} \sim \frac{1}{Re_0^{1/2}} \quad ; \quad Re_\lambda > 1 \quad (I.2.2)$$

- **Escala de Kolmogorov** (μ). Es la escala espacial más pequeña. A este nivel, los vórtices de menor tamaño se disipan y convierten en energía interna a través de la acción de las fuerzas viscosas, dominadas por la viscosidad molecular. Las escalas de Kolmogorov se caracterizan por fluctuaciones de elevada frecuencia asociadas al desarrollo de estructuras isotrópicas. Esta escala queda definida como:

$$\frac{\mu}{L_0} \sim \frac{1}{Re_0^{3/4}} \quad ; \quad Re_\mu = 1 \quad (I.2.3)$$

Tras introducir las escalas de la turbulencia, puede profundizarse en la caracterización de la cascada de energía. Kolmogorov definió una región denominada *inertial subrange* o subrango inercial, en la que fundamentalmente se experimenta una transferencia sucesiva de energía cada vez a menor escala. De esta manera, estableció la “**ley de los 5/3**”, describiéndose así la pendiente de la cascada de energía en el subrango inercial. La expresión obtenida a partir del análisis dimensional (Teorema de Pi-Buckingham [38]) sigue la Ecuación (I.2.4).

$$E(\kappa) \sim A\kappa^{-5/3}\epsilon^{2/3} \tag{I.2.4}$$

donde $E(\kappa)$ es la energía turbulenta en función de la frecuencia o número de onda κ , definido según la Ecuación (I.2.5) y relacionado a su vez con la longitud característica de las escalas; y ϵ es el ratio de disipación de energía. A es una constante de ajuste experimental comprendida entre 1,5 y 1,8 en función de la aplicación y número de Reynolds del problema.

$$\kappa = \frac{2\pi}{l} \tag{I.2.5}$$

siendo l la longitud característica, y en este contexto la escala espacial de la turbulencia.

En resumen, las escalas de la turbulencia se encuentran asociadas a tres mecanismos físicos diferenciados en la evolución de la energía turbulenta $E(\kappa)$. En primer lugar, la producción de energía tiene lugar en las escalas integrales del problema, dependientes de L_{ref} y de la velocidad del flujo medio. Tras ello, ocurre la cascada de energía, donde no existe un dominio ni del flujo medio ni de los efectos disipativos: simplemente la inestabilidad de los torbellinos grandes desemboca en su rotura en torbellinos más pequeños y así sucesivamente. Este hecho permite introducir la definición de unas escalas intermedias, denominadas escalas de Taylor, para las que la energía se transfiere de manera no lineal de acuerdo con la “ley de los 5/3” dentro del subrango inercial. Finalmente, la disipación de la energía se produce en los vórtices de menor tamaño, donde las escalas de Kolmogorov están dominadas por los efectos viscosos, dependientes de la viscosidad molecular.

De las evidencias anteriores, se refleja la complejidad de estudiar la turbulencia analíticamente. De hecho, su carácter impredecible lo hace inviable, siendo necesario el uso de técnicas computacionales. En concreto, se emplean tres enfoques CFD principales: DNS (*Direct Numerical Simulation*), LES (*Large Eddy Simulation*) y RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*). La principal diferencia entre ellos reside en la manera de tratar las ecuaciones con vistas a capturar las escalas espaciales y temporales de los remolinos turbulentos, modelando algunas de ellas y resolviendo otras.

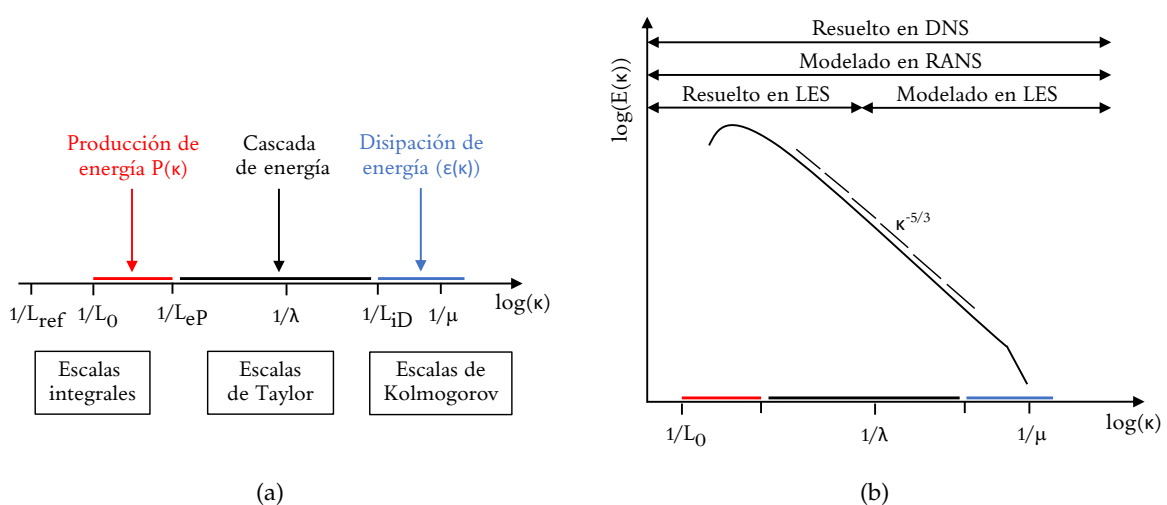


Figura I.1: Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos - Esquema descriptivo de: (a) rangos y escalas espaciales de la turbulencia, y (b) modelado de la turbulencia según el enfoque computacional.

I.2.2. Enfoques computacionales: RANS, LES y DNS

El objetivo de este apartado es introducir los principales enfoques empleados para predecir y modelar los efectos de la turbulencia, detallándose posteriormente los aspectos más notorios de los enfoques computacionales más extendidos. Estos son las simulaciones RANS, LES y DNS.

Antes de describir los enfoques computacionales más extendidos, se introducen las principales aproximaciones empleadas para la predicción y modelado de los efectos de la turbulencia [36]. Estas son:

1. **Correlaciones**, como la empleada para relacionar el factor de fricción en función del número de Reynolds o el número de Nusselt de la transferencia de calor como función de los números de Reynolds y de Prandtl. Este enfoque, habitualmente empleado en cursos introductorios de turbulencia, es muy útil pero está limitado a la resolución de problemas sencillos. Además, no se requiere del empleo de recursos computacionales, ya que se fundamenta sobre expresiones semi-empíricas.

$$C_f = f(Re) \quad ; \quad Nu = f(Re, Pr) \quad (I.2.6)$$

2. **Ecuaciones integrales**, obtenidas mediante la integración de las ecuaciones del movimiento. Esto reduce el problema a una serie de ecuaciones diferenciales ordinarias, fácilmente resolubles.
3. **RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*)**, fundamentado en el promediado temporal de las ecuaciones de movimiento (si el flujo es “estadísticamente estacionario”) sobre una coordenada espacial en la que el flujo medio no varía. Este nivel de aproximación, conocido como *one-point closure*, se basa en la obtención de una serie de ecuaciones en derivadas parciales denominadas *Reynolds Averaged Navier-Stokes*. Estas ecuaciones presentan un problema de cierre, lo que hace necesario introducir algunas aproximaciones adicionales: los modelos de turbulencia.
4. **Métodos *two-point closure***, que emplean ecuaciones para la correlación de las componentes de la velocidad en dos o más coordenadas espaciales. Estas aproximaciones son raramente empleadas, excepto para casos con turbulencia homogénea.
5. **LES (*Large Eddy Simulation*)** es un enfoque basado en la resolución de las escalas más grandes del movimiento y modelado de las escalas de menor tamaño. Por tanto, los métodos LES representan un compromiso entre las simulaciones RANS y DNS.
6. **DNS (*Direct Numerical Simulation*)** conlleva la resolución de las ecuaciones discretizadas de Navier Stokes para todas las escalas del movimiento.

A medida que se progresa en el listado anterior, aumenta la cantidad de movimiento de naturaleza turbulenta que se resuelve. Esto hace que los últimos métodos sean más exactos, pero el tiempo de cálculo aumenta considerablemente.

Todas las aproximaciones expuestas requieren la solución de las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento, energía y/o especies químicas. La mayor dificultad es que los flujos turbulentos involucran una amplia variedad de escalas temporales y espaciales en comparación con los flujos laminares. Esto provoca que los flujos turbulentos sean más difíciles y costosos de resolver.

RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*)

Para un flujo estadísticamente estacionario, cualquier variable $\phi(x_i, t)$ puede escribirse como la suma de su valor medio temporal y una fluctuación, de acuerdo con la Ecuación (I.2.7).

$$\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i) + \phi'(x_i, t) \quad (\text{I.2.7})$$

donde:

- $\bar{\phi}(x_i)$ es el valor medio y se obtiene a partir de la Ecuación (I.2.8). Si el intervalo empleado para el promediado temporal T es suficientemente grande respecto a la escala temporal típica de las fluctuaciones, el valor medio $\bar{\phi}$ es independiente de la variable temporal t .

$$\bar{\phi}(x_i) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \phi(x_i, t) dt \quad (\text{I.2.8})$$

- $\phi'(x_i, t)$ es el término fluctuante.

Además, aplicando la Ecuación (I.2.8) sobre el término fluctuante (i.e, calculando el promedio temporal de las fluctuaciones) se deduce que $\overline{\phi'(x_i, t)} = 0$. Por su parte, es posible introducir una definición adicional, conocida como **intensidad turbulenta**. Su expresión se define según la Ecuación (I.2.9) y expresa el ratio del valor absoluto de la fluctuación promedio respecto al valor temporal promedio de una variable genérica ϕ .

$$I = \frac{\sqrt{\overline{\phi'^2(x_i)}}}{\bar{\phi}(x_i)} \quad (\text{I.2.9})$$

Tras aplicar estos conceptos sobre las ecuaciones de Navier-Stokes, se obtienen las **ecuaciones promediadas de Navier-Stokes** (RANS, del inglés *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) [36] [37] [39]. El promediado de los términos lineales resulta en la obtención de términos idénticos para la variable promedio $\bar{\phi}$. Sin embargo, los términos cuadráticos no lineales, tras ser promediados, introducen términos adicionales no resueltos como el tensor de esfuerzos de Reynolds ($\overline{\rho u'_i u'_j}$) o el flujo escalar turbulento ($\overline{\rho u'_i \phi'}$), entre otros. La aparición de estos términos, que no pueden expresarse directamente en función de variables promediadas, deriva en el conocido como **problema de cierre** de las ecuaciones RANS. Para solventarlo, se requiere el uso de modelos aproximados: los **modelos de turbulencia**.

Como consecuencia, aparecen diferentes procedimientos o modelos RANS para cerrar las ecuaciones. Todos ellos se pueden agrupar en tres categorías: modelos viscosos lineales, modelos viscosos no lineales y el modelo de esfuerzos de Reynolds (RSM), siendo la primera categoría la más extendida y generalizada. Sin embargo, no se adentra en los fundamentos matemáticos de los modelos de turbulencia RANS, dado que no son objeto de estudio en el presente Trabajo Final de Máster.

DNS (*Direct Numerical Simulation*)

En el extremo opuesto a los modelos RANS se encuentra el enfoque DNS, consistente en la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes sin promediados o aproximaciones más allá de la discretización numérica de las mismas. Por ello, las simulaciones DNS son las más exactas y costosas, así como las más sencillas conceptualmente.

Todas las escalas turbulentas son resueltas en tiempo y espacio en una malla dada, desde el flujo medio hasta las escalas disipativas de Kolmogorov. Un dominio de cálculo habitual se extiende como mínimo hasta varias veces el tamaño de las escalas integrales L_0 en cada una de sus dimensiones. A su vez, una simulación DNS bien configurada debe ser capaz de capturar los fenómenos de la disipación energética y por tanto el tamaño máximo de cada celda está limitado por las escalas de Kolmogorov ($\Delta x \sim \mu$). Tal y como se ha especificado en la Ecuación (I.2.3) al describir las escalas de la turbulencia, la relación L_0/μ se escala con $Re_0^{3/4}$.

En consecuencia, para un dominio tridimensional uniforme (e.g. problema con turbulencia homogénea) y considerando que el paso temporal es proporcional al tamaño de malla a causa de la condición necesaria pero no suficiente de Courant-Friedrichs-Levy [46], el coste computacional de una simulación DNS es proporcional a Re_0^3 .

$$CFL = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \rightarrow \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} < CFL \text{ para cálculo estable} \quad (\text{I.2.10})$$

$$n_{\text{celdas } 1D} \approx \frac{L_0}{\mu} \sim Re_0^{3/4} \xrightarrow{3D+CFL} \text{Coste} \approx \left(\frac{L_0}{\mu}\right)^4 \approx Re_0^3 \quad (\text{I.2.11})$$

Por tanto, dado que el número de celdas a emplear está restringido por la potencia de cálculo disponible, las simulaciones DNS solo son posibles para flujos con números de Reynolds moderados y geometrías relativamente pequeñas y/o sencillas. Por ello, el enfoque DNS es una herramienta extendida en el ámbito de la investigación, destacándose entre sus aplicaciones el desarrollo de modelos LES y RANS a partir del entendimiento de los mecanismos de la producción de turbulencia, transferencia de energía y disipación de los flujos turbulentos gracias a la precisión de las simulaciones DNS. Cabe apuntar que el programa FDS[®] permite llevar a cabo este tipo de cálculos. Sin embargo, en el presente Trabajo Final de Máster se opta por el emplear el enfoque LES para el modelado de la turbulencia.

LES (*Large Eddy Simulation*)

Los modelos de turbulencia LES representan el punto intermedio entre las simulaciones DNS y RANS. Las escalas más grandes del movimiento son generalmente las más energéticas y, por tanto, las más efectivas en el transporte de las variables conservativas. Por su parte, las escalas de menor tamaño son mucho más débiles y apenas intervienen en los fenómenos de transporte de masa, cantidad de movimiento y energía. Por tanto, un enfoque que resuelva explícitamente las escalas turbulentas de mayor tamaño y modele las escalas pequeñas podría ser interesante; pilar sobre el que se fundamentan las simulaciones LES. Por ello, una variable genérica ϕ puede expresarse en función de dos contribuciones: el campo resuelto $\bar{\phi}$ y el campo *subgrid scale* ϕ_{SGS} ($\phi = \bar{\phi} + \phi_{SGS}$).

Para determinar el límite de las escalas de la turbulencia a modelar, se introduce un **filtro de corte** asociado a una longitud característica o escala espacial Δ_e . Tal y como sigue en la Ecuación (I.2.12), el tamaño del filtro se calcula habitualmente como la raíz cúbica del volumen de la celda de interés (V_e), ponderando el resultado con un factor de seguridad (F) [47].

$$\Delta_e = (V_e)^{1/3} \cdot F \quad (\text{I.2.12})$$

Así que, aproximadamente, las escalas espaciales mayores que Δ_e se resuelven, mientras que las escalas menores son modeladas.

Tras aplicar el filtrado sobre las ecuaciones de Navier-Stokes, se obtiene un conjunto de ecuaciones LES muy similares a las ecuaciones RANS. En este caso, aparece un término denominado *subgrid-scale Reynolds stress* (SGS *Reynolds stress*), es decir, un tensor de esfuerzos de Reynolds asociado a las escalas situadas por debajo del filtro. El término “tensor de esfuerzos” hace referencia a su tratamiento matemático, ya que su naturaleza física es la de un flujo de cantidad de movimiento asociado a las escalas más grandes y motivado por la acción de las escalas más pequeñas o no resueltas. Los modelos empleados para modelar dicho tensor (ver Ecuación (I.2.13)) son los **modelos subgrid-scale (SGS)** o **subfilter-scale**.

$$\tau_{ij}^s = -\rho \cdot (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (\text{I.2.13})$$

Los modelos SGS reproducen los flujos de energía entre las escalas resueltas y no resueltas. Para ello, se basan en el campo de velocidades local o, en su defecto, en la historia pasada del flujo local. Los modelos SGS más extendidos en FDS[®] se presentan a continuación [12].

Modelo Smagorinsky. Es el modelo SGS más simple, ya que asume un equilibrio entre la producción y disipación de energía cinética turbulenta, resultando en una viscosidad turbulenta ν_t definida según la Ecuación (I.2.14) [48]. Dicho modelo era la opción predeterminada para las versiones 1-5 de FDS[®].

$$\nu_t = (C_s \cdot \Delta_e)^2 \cdot \sqrt{2 \cdot \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (\text{I.2.14})$$

donde:

- Δ_e es el tamaño del filtro.
- C_s es un constante del modelo entre 0,1 y 0,18, en función del número de Reynolds del problema y otros grupos adimensionales.
- \bar{S}_{ij} es el tensor de esfuerzos tras el filtrado SGS, el cual se modela a partir de la Ecuación (I.2.15).

$$\tau_{ij}^s - \frac{1}{3} \cdot \tau_{kk}^s \cdot \delta_{ij} = \mu_t \cdot \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) = 2 \cdot \mu_t \cdot \bar{S}_{ij} \quad (\text{I.2.15})$$

Una de las limitaciones de este modelo es que, generalmente, sobrestima el valor de ν_t en zonas de gradientes importantes, ya que no realiza una distinción apropiada entre zonas puramente viscosas y turbulentas. Para solventarlo, el modelo *Dynamic Smagorinsky* establece el valor de la constante C_s como variable entre las diferentes zonas del dominio, de manera que toma el valor más adecuado a su naturaleza; estando dicho modelo también disponible en FDS[®].

Modelo Deardorff. Es el modelo predeterminado a partir de la versión 6 de FDS[®]. La viscosidad turbulenta μ_t se define según la Ecuación (I.2.16).

$$(\mu_t / \rho) = C_v \cdot \Delta_e \cdot \sqrt{k_{SGS}} \quad (\text{I.2.16})$$

donde:

- Δ_e es el tamaño del filtro.
- C_v es la constante del modelo e igual a 0,1.
- k_{SGS} es la energía cinética turbulenta modelada o *sub-grid scale*, es decir, aquella porción asociada a los torbellinos con tamaño menor al mallado.

I.2.3. Tratamiento de pared

Las proximidades a las paredes en un dominio computacional son regiones críticas en la mayoría de los problemas. Las paredes son una fuente de vorticidad importante y requieren de un tratamiento especial para predecir adecuadamente el campo de velocidades y los efectos de la turbulencia en la conocida como “capa límite” [49].

La **capa límite** es una capa muy delgada, localizada en la cercanía de las paredes, donde los esfuerzos viscosos son equiparables a las fuerzas inerciales y por tanto no pueden ser despreciados en el cómputo de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento. A este respecto, se define una longitud adimensional conocida como y^+ que define la distancia normal a la pared, cuya expresión sigue la Ecuación (I.2.17). Atendiendo a la disposición de celdas en una malla, el valor de y^+ que caracteriza un mallado representaría la posición del centroide de la primera celda contigua a la pared en dirección perpendicular a la misma.

$$y^+ = \frac{y \cdot u_\tau}{\nu} \quad (\text{I.2.17})$$

donde:

- y es la distancia normal a la pared.
- u_τ es la denominada como velocidad de fricción, calculada como $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho}$, siendo τ_w los esfuerzos cortantes en la pared (ver Ecuación (I.2.18)) y ρ la densidad del fluido de estudio.

$$\tau_w = \rho \cdot \nu \cdot \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{y=0^+} \quad (\text{I.2.18})$$

- ν es la viscosidad cinemática del fluido de estudio.

Además, para la completa caracterización de la capa límite resulta imprescindible introducir una segunda variable adimensional, pero esta vez con función de velocidad característica. Se denomina u^+ y su expresión se recoge en la Ecuación (I.2.19). Habitualmente el campo de velocidades experimenta un elevado gradiente a lo largo del desarrollo de la capa límite, transitando desde la velocidad nula en la pared (condición de no deslizamiento) hasta la velocidad del flujo medio.

$$u^+ = \frac{\bar{u}}{u_\tau} \quad (\text{I.2.19})$$

donde \bar{u} es la velocidad del flujo medio y por ende es función de la distancia normal y .

En función del valor de y^+ , se pueden distinguir tres regiones distintas en la región interna de la capa límite, cuyas características son descritas a continuación:

- Subcapa viscosa: Es la zona inmediatamente contigua a la pared, donde los efectos viscosos predominan respecto a los inerciales. En esta región se define la **ley de pared**, recogida en la Ecuación (I.2.20), la cual establece una relación lineal entre y^+ y u^+ . Su empleo es completamente válido hasta $y^+ < 5$, si bien puede extenderse hasta $y^+ \approx 12$, pero introduciéndose una sobreestimación cercana al 25% [50].

$$u^+ = y^+ \rightarrow \frac{\bar{u}}{u_\tau} = \frac{y \cdot u_\tau}{\nu} \quad (\text{I.2.20})$$

- Capa *buffer*: Es una región de transición entre la subcapa viscosa y el flujo más alejado de la pared. Está delimitada en un rango $5 < y^+ < 30$, donde el gradiente de velocidades es elevado y el comportamiento del fluido es inestable e incierto; motivo por el cual los códigos CFD no recomiendan introducir la primera celda contigua a la pared en esta zona.
- Capa logarítmica: Es la capa más alejada de la pared. En ella, el perfil de velocidades es logarítmico y tiene lugar principalmente la conversión de energía cinética del flujo medio en energía cinética turbulenta. Viene definida por la **ley logarítmica** de la Ecuación (I.2.21) y es válida para $y^+ > 30$, si bien intersecta con la ley de pared para $y^+ \approx 11$.

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \cdot \ln(y^+) + B \rightarrow \frac{\bar{u}}{u_\tau} = \frac{1}{\kappa} \cdot \ln\left(\frac{y \cdot u_\tau}{\nu}\right) + B \quad (\text{I.2.21})$$

donde κ es la constante de Karman con valor $\kappa \approx 0,41$ y B es otra constante adimensional con valor $B \approx 5,1$ [51].

A continuación, en la Figura I.2 se muestra la evolución del perfil de velocidades adimensional u^+ a lo largo del espesor de la capa límite, representado en escala logarítmica para y^+ . Cabe apuntar que se recogen las leyes expuestas anteriormente (en azul) frente a los resultados derivados a partir de datos experimentales y simulaciones DNS para caracterizar el flujo turbulento desarrollado en un canal (en rojo) [52].

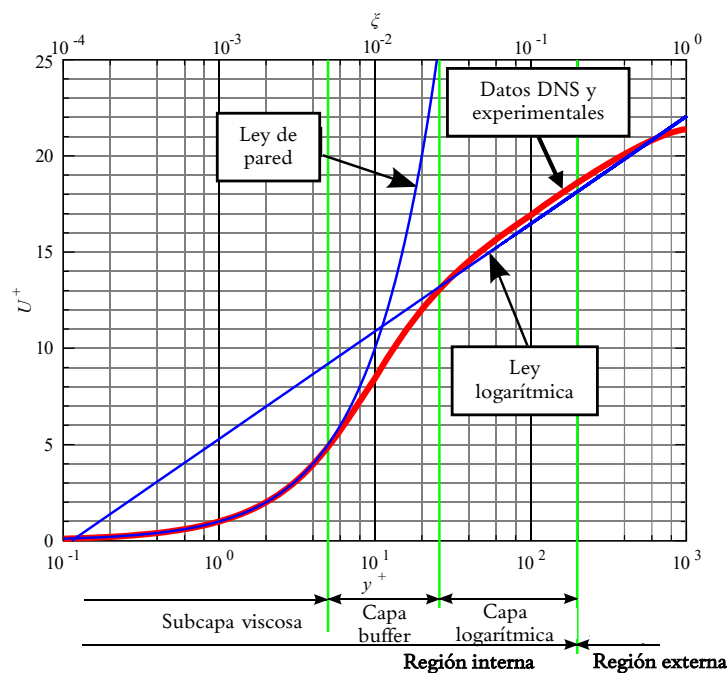


Figura I.2: Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos - Leyes para el tratamiento de la pared. Adaptada de [50].

En este sentido, los códigos CFD permiten emplear dos enfoques diferenciados para el tratamiento de la pared. Por un lado, puede optarse por la resolución de la capa límite, lo cual hace necesario ubicar el centroide de la primera celda dentro de la subcapa viscosa. En concreto, se recomienda el uso de un valor de $y^+ < 1$, de manera que se requiere un elevado número de celdas en la cercanía de la pared para poder capturar correctamente el elevado gradiente experimentado por el campo de velocidades en dicha región. En consecuencia, el coste computacional global de la simulación aumenta considerablemente.

Por otro lado, los programas CFD cuentan con ecuaciones empíricas que reproducen aproximadamente el comportamiento del flujo en el interior de la capa límite, permitiendo la transición entre el flujo de la pared y el flujo medio de la corriente libre. Estas ecuaciones son conocidas como “funciones de pared” y se fundamentan en el modelado de la capa límite de acuerdo con el comportamiento expuesto por los datos DNS y experimentales recogidos en la Figura I.2. En estos casos, los programas CFD recomiendan ubicar el centroide del primer elemento de la malla entorno a $y^+ > 30$, evitándose ubicar celdas dentro de la capa buffer, tal y como se ha comentado anteriormente. Sin embargo, las funciones de pared conducen a equívocos o errores de modelado cuando se trabaja con flujos con elevados gradientes de presión adversos o favorables, desprendimientos y elevada curvatura; características ausentes en el flujo tomado como referencia (flujo turbulento desarrollado en un canal).

Los modelos de turbulencia presentes en los programas de CFD suelen presentar la capacidad de adaptarse entre los dos enfoques expuestos, resolviéndose la capa límite cuando se emplean valores de $y^+ < 1$. Las diferencias en el mallado entre ambos enfoques se reflejan de forma esquemática en la Figura I.3.

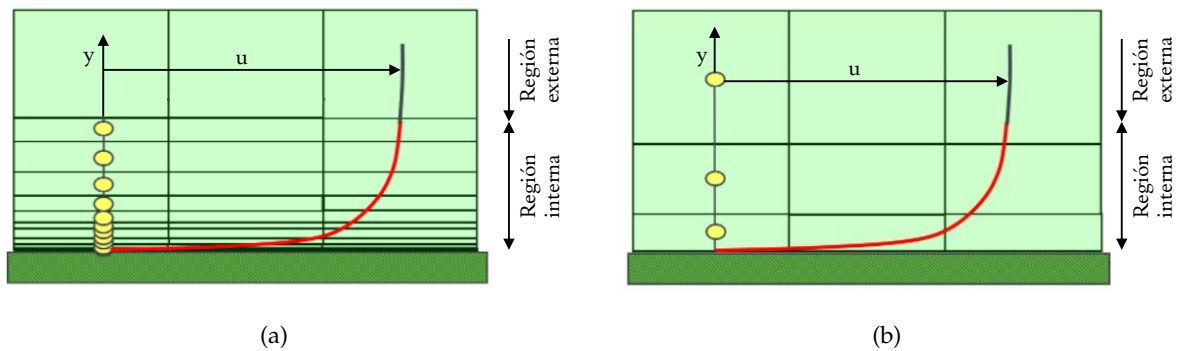


Figura I.3: Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos - Esquema descriptivo de: (a) resolución de la capa límite, y (b) modelado de la capa límite mediante funciones de pared. Adaptada de [53].

En el caso de las simulaciones LES, la formulación de los modelos SGS no permite satisfacer la condición $\nu_t = 0$ en las paredes, lo cual conduce a resultados no físicos donde los torbellinos cercanos a las paredes no se disipan [54]. Con tal de solventar este error de modelado, resulta necesario introducir restricciones adicionales mediante el uso de **modelos de pared** (en la literatura, *near-wall treatment*). Entre las opciones disponibles en FDS[®], destacan el modelo de Smagorinsky con la función de amortiguamiento de Van Driest y el modelo WALE. En ningún caso, este software permite resolver el flujo de la pared, de manera que se recomienda emplear un $y^+ = 30$ para resultados óptimos, mientras que valores entorno a 100 pueden usarse para aplicaciones generales [12].