

Influencia del modelo de turbulencia y del refinamiento de la discretización espacial en la exactitud de las simulaciones computacionales de incendios

J.A. Capote, D. Alvear, O.V. Abreu, M. Lázaro y P. Espina

Grupo GIDAI – Seguridad contra Incendios – Investigación y Tecnología
E.T.S. de Ingenieros Industriales y de Telecomunicaciones, Universidad de Cantabria
Avenida Los Castros, s/n; 39005 Santander, España
Tel.: 34 942 201826; Fax: 34 942 201873; e-mail: capotej@unican.es;
alveard@unican.es; abreuo@unican.es; lazaron@unican.es; espinap@unican.es

Resumen

El tratamiento de la turbulencia es un problema complejo al que se han dedicado innumerables investigaciones debido a que afecta sensiblemente a la exactitud de los resultados, determinando el comportamiento del flujo de humos y gases y con ello, todo el proceso de propagación másica y energética del incendio. Igualmente el grado de refinamiento de la discretización espacial para la resolución de las ecuaciones de gobierno, afecta sensiblemente la exactitud de las simulaciones de incendios, con lo que la selección del tamaño óptimo de rejilla es uno de los problemas más importantes en el apropiado uso de estos modelos. Actualmente no existe ningún método para la selección de este tamaño, tomándose como única referencia la experiencia del usuario.

El presente trabajo presenta los principales modelos de turbulencia empleados en la Simulación Computacional de Incendios haciendo énfasis en el Modelo ‘Large Eddy Simulation’, LES, empleado en ‘Fire Dynamics Simulator’, FDS, del NIST. Se analizará la influencia del tamaño del mallado y de los diferentes parámetros específicos del modelo LES de Smagorinsky en los resultados obtenidos para lo cual se estudiará un salón de 4.6m x 5.2m x 2.4m con varios muebles y una puerta de 0.9m x 2m.

Los resultados obtenidos muestran la importancia de una correcta selección de un tamaño de rejilla apropiado a la hora de tener unos resultados razonablemente buenos. Además se introducirá el empleo de una metodología para la selección del tamaño de rejilla en FDS y para el cálculo de los diferentes errores que acarrearía la selección de una u otra rejilla.

Palabras clave: *modelos de turbulencia, modelado y simulación computacional de incendios, discretización espacial, tamaño de rejilla.*

INFLUENCE OF TURBULENCE MODEL AND GRID SIZE OF THE SPATIAL DISCRETIZATION IN THE ACCURACY OF RESULTS OF FIRE COMPUTER MODELS

Summary

The treatment of turbulence is a complex problem and innumerable investigations have been dedicated to their study. The Turbulence Model considerably affects the exactitude of the results of Computational Fire Models: determines the behavior of the smoke and gas flow and includes all the spread process of mass and energy. Similarly, the degree of refinement of space discretization in the resolution of the government equations, whatever turbulence model used, affects sensibly the exactitude of the simulation results. The selection of the optimal grid size is one of the most important problems in the appropriate use of Computer Fire Models and, at the moment, only the user's experience can help to select its value.

The research work presents a discussion of the main turbulence models used in Computer Fire Models. The ‘Large Eddy Simulation’, LES, turbulence model used in ‘Fire Dynamics Simulator’, FDS, created by the NIST, is analyzed. The influence of the grid size and the different parameters of the LES Smagorinsky Model in the results obtained are evaluated. So, a living room of 4.6m x 5.2m x 2.4m with several furniture and a door of 0.9m x 2m was studied.

The results showed the importance of a correct selection of the grid size in the accuracy of the results. In addition, the use of a new methodology for the grid selection and the errors analysis of this grid in FDS Model are presented.

Keywords: *turbulence models, fire computer models, spatial discretization, grid size.*

INTRODUCCIÓN A LOS MODELOS DE TURBULENCIA

Los flujos de gases que tienen lugar durante un incendio son indiscutiblemente turbulentos debido a la intensidad de los procesos térmicos que provocan grandes números de Reynolds. El tratamiento de la turbulencia es un problema complejo al que se han dedicado innumerables investigaciones. Las primeras investigaciones fundamentales sobre el tema fueron desarrolladas por Kolmogorov en los primeros años de la década del 40¹ del siglo pasado que se apoyaron en los resultados obtenidos por Reynolds en 1883.

El desarrollo de la Fluidodinámica Computacional (CFD) trajo aparejada la necesidad de la representación computacional del proceso de la turbulencia y esto dio lugar a varios modelos computacionales de turbulencia²⁻⁴, que se pueden agrupar en:

- Modelos promediados de Reynolds de las ecuaciones de Navier – Stokes (RANS).
- Modelos de Simulación de Grandes Remolinos (LES).
- Modelos de Simulación Numérica Directa (DNS).

MODELOS PRIMARIOS DE TURBULENCIA

La turbulencia puede ser caracterizada como el movimiento caótico o desordenado del fluido. Un movimiento turbulento del fluido tiene lugar con la presencia de remolinos, mientras que cuando estos están ausentes el movimiento del fluido es laminar.²

El surgimiento de la turbulencia está relacionado con la relación entre las fuerzas de inercia y las fuerzas viscosas en el fluido: cuando las fuerzas viscosas son suficientemente grandes con respecto a las iniciales, estas son capaces de amortiguar los pequeños remolinos y el fluido tiende a ser laminar. Si por el contrario las fuerzas viscosas son pequeñas con relación a las iniciales, este proceso de amortiguación no tiene lugar y se producen remolinos tanto a pequeña escala como a escalas mayores.

Estas características del movimiento de los fluidos (laminares o turbulentos) fueron analizadas por Reynolds en su aplicación al movimiento de líquidos por tuberías. El introdujo el afamado número que lleva su nombre (Re), que se define como:

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} = \frac{uL}{\nu} \quad (1)$$

Donde ρ es la densidad del fluido; u es la velocidad media del fluido; L es el largo característico; μ es la viscosidad dinámica del fluido y ν es la viscosidad cinemática del fluido. El número de Reynolds es un índice de la turbulencia del fluido. Se obtiene como la relación entre las fuerzas iniciales y las viscosas:

$$Re \equiv \frac{F_{iniciales}}{F_{viscosas}} = \frac{|\bar{u} \cdot \nabla \bar{u}|}{|\nu \nabla^2 \bar{u}|} \approx \frac{uL}{\nu} \quad (2)$$

El número de Reynolds también puede interpretarse como la relación entre las máximas y las mínimas escalas longitudinales o tamaños de los remolinos, desde los más grandes a los más pequeños (Figura 1).

Las escalas de los remolinos pueden variar desde la más grande, que en ocasiones se denomina escala longitudinal integral (l_t), denotando que las ecuaciones de movimiento deben ser integradas en esa escala para capturar el comportamiento de los grandes remolinos, hasta la más pequeña (η_k), denominada escala longitudinal de Kolmogorov¹.

La teoría clásica de la turbulencia de Kolmogorov¹ se fundamenta en su teoría de mutua semejanza y plantea que la energía cinética k de los remolinos de mayor escala fluye hacia

los de menor escala a través de un mecanismo de cascada. Además, esa energía fluyente es constante entre las diferentes escalas longitudinales de los remolinos y esta dada por el coeficiente de disipación ε de la energía cinética k .

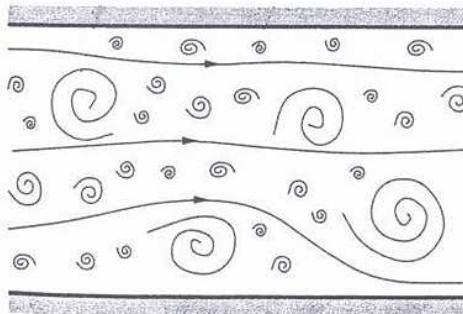


Figura 1. Diferentes escalas de remolinos en fluidos turbulentos

Este coeficiente se define como la relación entre la energía cinética u^2 y la escala temporal r/u , siendo r la longitud entre las diferentes escalas:

$$\varepsilon = \frac{u^2}{\frac{r}{u}} = \frac{u^3}{r} \quad (3)$$

A lo largo de la cascada de remolinos los números de Reynolds van desde Re_t hasta valores cercanos a la unidad. Este límite ($Re = 1$) define la escala más pequeña que puede encontrarse en el flujo turbulento y es precisamente la escala de Kolmogorov de la longitud (η_k).

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (4)$$

Existen también escalas de Kolmogorov en el tiempo y para la velocidad, definidas como:

$$\tau_k = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} ; \quad v_k = (\nu \varepsilon)^{\frac{1}{4}} \quad (5)$$

La relación entre las escalas longitudinales integral y de Kolmogorov ofrece una comparación dimensional entre los remolinos más grandes y más pequeños.

$$\frac{l_t}{\eta_k} = \frac{\frac{u^3}{\varepsilon}}{\left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}}} = Re_t^{\frac{3}{4}} \quad (6)$$

Otra forma de caracterizar cuantitativamente la turbulencia es mediante las fluctuaciones de las magnitudes que caracterizan al fluido, especialmente la velocidad (aunque puede ser cualquier otra magnitud). Sea f una magnitud cualquiera del fluido que la representaremos como la suma de su valor medio \bar{f} y una componente fluctuacional f' , de tal forma que:

$$f = \bar{f} + f' \quad (7)$$

Entonces la fortaleza de la turbulencia puede caracterizarse mediante la denominada intensidad de la turbulencia I que es la relación entre la desviación estándar de la magnitud elegida y su valor medio:

$$I = \frac{\sqrt{f'^2}}{\bar{f}} \quad (8)$$

MODELOS COMPUTACIONALES PARA EL CÁLCULO DE LA TURBULENCIA

Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)

Los modelos RANS se basan en la promediación de las ecuaciones del fluido, para lo cual todas las magnitudes se sustituyen por la suma de su valor medio y una componente fluctuacional (7). Después de promediarlas se obtienen términos adicionales que requieren la adición de otras ecuaciones para cerrar el sistema. Se presentan dos variantes principales de promediación: la de Reynolds y la de Favre. Esta última emplea magnitudes promediadas por unidad de masa, de tal forma que (7) se transforma en⁵:

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (9)$$

donde $\tilde{f} = \frac{\rho f}{\bar{\rho}}$ es la magnitud promediada por unidad másica.

En todos los casos la dificultad para el cierre del sistema de ecuaciones se deriva de la elección de ecuaciones para representar el tensor de tensiones τ_{ij} que representa las tensiones turbulentas de Reynolds. Para ello se emplea la asunción propuesta por Boussinesq⁶ según la cual:

$$\tau_{ij} = \mu_t \left(2S_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}(\nabla \cdot \bar{u}) \right) \quad (10)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (11)$$

donde μ_t es el coeficiente de viscosidad dinámica considerando la densidad promediada.

Existen en la actualidad diferentes métodos o modelos de solución para el RANS encaminados a calcular este coeficiente de viscosidad, los grandes grupos se pueden dividir en los siguientes apartados:

Modelos de cero ecuaciones

El método más sencillo para hallar μ_t es emplear un modelo que no precise del cálculo de ninguna ecuación adicional. Esta es la base del modelo de longitud mezclada de Prandtl⁷ que establece un enlace entre μ_t y el gradiente de velocidad a través de una expresión algebraica.

$$\mu_t = \bar{\rho} l_{min}^2 \left| \frac{du}{dy} \right| \quad (12)$$

siendo l_{min} una longitud de mezcla que se calcula según la geometría del flujo. Existen otros modelos más complejos de cero ecuaciones que se basan en este, como el modelo de Baldwin-Lomax^{8,9} y el modelo de Cebeci-Smith¹⁰.

Modelos de una ecuación

Existen diferentes modelos que emplean una ecuación para calcular μ_t , el modelo de Baldwin-Barth¹¹, el modelo de Spalart-Allmaras^{12,13}, el modelo de Prandtl-Kolmogorov⁴, etc. El modelo de Prandtl-Kolmogorov incorpora una ecuación de dependencia de μ_t con la energía cinética k al sistema de ecuaciones de gobierno del fluido.

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu l_{pk} \sqrt{k} \quad (13)$$

donde C_μ es una constante y l_{pk} es una longitud que se calcula mediante diferentes formulaciones existentes.

Modelos de dos ecuaciones

Los modelos de dos ecuaciones son los más empleados dentro de los modelos RANS para el MSCI. Existen diferentes modelos dentro de este apartado, siendo los más conocidos el modelo $k-\varepsilon$ y el modelo $k-\omega$.

- El modelo $k-\varepsilon$ ^{14,16} incorpora dos ecuaciones de balance en derivadas parciales en las que interrelacionan la energía cinética del fluido turbulento k y su velocidad de disipación ε al sistema de ecuaciones del fluido. Mediante estas dos ecuaciones se calculan los valores de estas variables para posteriormente calcular μ_t .

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (14)$$

- El modelo $k-\omega$ ^{4,17,18} también emplea dos ecuaciones que interactúan para el posterior cálculo de μ_t , en este caso de la energía cinética del fluido turbulento k y de la disipación específica ω . Esta última variable determina la escala de la turbulencia, mientras que k determina la energía de la turbulencia.

$$\mu_t = \bar{\rho} \frac{k}{\omega} \quad (15)$$

Modelos de más ecuaciones

Existen modelos que emplean un mayor número de ecuaciones para poder calcular el valor de μ_t .

- Cuatro ecuaciones (v^2-f)¹⁹⁻²⁰: son modelos similares al $k-\varepsilon$ estándar, aunque incorporan también alguna anisotropía turbulenta en las cercanías de las paredes y efectos no locales de presión-torsión.
- Reynolds stress model (RSM)²¹: son modelos que emplean siete ecuaciones para el cálculo de μ_t . Este método intenta resolver las ecuaciones del transporte para las tensiones de Reynolds. Esto significa la introducción de varias ecuaciones del transporte para todas las tensiones de Reynolds y por lo tanto un mayor coste computacional. Actualmente hay muchas investigaciones en curso sobre este método, proponiéndose continuamente nuevos modelos. Todavía no está claro qué modelo es el mejor para cada clase de flujo debido al hecho de que al estar en la necesidad de resolver un gran número de ecuaciones no se sabe si los errores numéricos que se generan son excesivamente grandes.

Large Eddy Simulations (LES)

El modelo LES se basa en un filtrado espacial de las ecuaciones de gobierno del fluido de tal manera que se resuelven computándose las grandes escalas (el movimiento turbulento de grandes remolinos), mientras que para escalas más pequeñas se asume un modelo que permite considerar de forma aproximada su influencia en la variación general de los parámetros del flujo.

Teóricamente esto corresponde al filtrado matemático de las ecuaciones de conservación mediante la convolución de estas con diferentes funciones filtrantes, que pueden ser de dependencia espacial o frecuencial. Comúnmente se emplean dos funciones espaciales, una de tipo rectangular y otra gausiana y una frecuencial de tipo filtro pasa bajo. Las más empleadas son las de filtrado espacial. Producto de este filtrado todas las variables de

las ecuaciones se representan como la suma de una componente de fondo (filtrada) y otra adicional fluctuante. Esto trae como consecuencia la aparición de nuevas variables en el sistema de ecuaciones que obliga a emplear expresiones adicionales para cerrar el sistema. Precisamente estas expresiones de cierre constituyen la modelación de los componentes turbulentos de menor escala espacial.

De acuerdo al método de filtrado y a la forma concreta de las expresiones de cierre se conocen varios submodelos dentro del LES, algunos de los cuales se muestran a continuación.

Submodelo de Smagorinsky²²

Es el modelo más conocido y popular debido a su sencillez. Fue propuesto por Smagorinsky en 1963 y emplea un filtrado espacial rectangular, modelando los pequeños remolinos con expresiones que permiten el cálculo aproximado de los coeficientes de viscosidad, de conductividad térmica y de disipación.

$$\mu_{LES} = \rho(C_S \Delta)^2 |\bar{S}|; \quad k_{LES} = \frac{\mu_{LES} c_p}{\Pr}; \quad (\rho D)_{l,LES} = \frac{\mu_{LES}}{Sc} \quad (16)$$

Este submodelo presenta como desventaja la incertidumbre de un coeficiente empírico en la expresión para el cálculo del coeficiente de viscosidad (del cual a la vez dependen los de conductividad y disipación) denominado coeficiente de Smagorinsky C_s .

Otra desventaja de este submodelo es que la operación de filtrado se realiza computacionalmente de manera automática empleando un malla espacial rectangular para el cálculo de todas las ecuaciones con tamaño fijo de celdas, siendo la exactitud de la solución bastante sensible a la elección de las dimensiones de la celda en dependencia del escenario concreto del incendio. Se plantea en la literatura que este submodelo tiende a ser muy disipativo, además de las desventajas señaladas presenta baja exactitud en flujos laminares, trascientes y en las cercanías de paredes.

Submodelo de similaridad de escala²³

Este modelo está basado en el anterior, asumiendo que los coeficientes de las escalas modeladas son idénticos a los de las calculadas. Este submodelo es poco disipativo y por ello no se emplea casi nunca de forma independiente. No obstante, su empleo conjunto con el submodelo de Smagorinsky reduce las inexactitudes provocadas por la incertidumbre del coef. C_s .

Submodelo dinámico de Germano²⁴

El submodelo dinámico de Germano, también está basado en el de Smagorinsky, tiene filtrado espacial rectangular fijo pero emplea un procedimiento automático para la determinación del coeficiente C_s , permitiendo que este coeficiente varíe en el espacio y en el tiempo. Este procedimiento consiste en la selección de una celda de prueba, de menor tamaño que la elegida para la solución computacional. Con la solución de las ecuaciones de gobierno del fluido en ambos tipos de celdas se conforma un sistema de cinco ecuaciones independientes de cuya solución se obtiene el coeficiente de Smagorinsky.

Submodelos de función estructural^{25,26}

Los submodelos de función estructural emplean el filtrado espectral y calculan un coeficiente de viscosidad para las escalas subceldicas basándose en una función proporcional al gradiente de la energía cinética del fluido.

Detached Eddy Simulation (DES)^{27,28}

Esta nueva técnica trata de aprovechar los puntos fuertes de los modelos RANS y LES, ya que como es conocido los modelos RANS son muy eficientes cerca de la frontera de contorno pero no se comportan tan bien en las regiones alejadas de ella, mientras que los modelos LES se comportan bien en regiones alejadas pero su comportamiento no es tan bueno en las regiones muy próximas a la frontera.

La modificación a los modelos RANS es sencilla, simplemente se sustituye la escala de longitud, d_w , que es la distancia a la pared más cercana, con una nueva escala de longitud de DES, \tilde{l} , que corresponde con el valor mínimo entre la longitud empleada anteriormente, d_w , y el tamaño de rejilla multiplicado por una constante de DES, C_{DES} .

$$\tilde{l} = \min(d_w, C_{DES}\Delta) \quad (17)$$

Direct Numerical Simulation (DNS)

El modelo de simulación numérica directa trata de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes de una forma directa, sin emplear más valores promedios o aproximaciones que las discretizaciones numéricas, por lo tanto es el más completo en cuanto a la exactitud de los resultados que ofrece.

El problema principal del modelo DNS es que el tamaño de las celdas para la solución de los remolinos en todas las escalas de existencia debe ser tan pequeño que la potencia computacional existente limita las dimensiones de los escenarios de incendios a los cuales puede actualmente aplicarse.

Comparación entre Modelos

El tratamiento que diferentes modelos dan al movimiento turbulento diferenciando su escala longitudinal puede apreciarse en la Figura 2, donde se muestra el espectro de la energía cinética de la turbulencia k en función del número de onda $\chi=2\pi/\lambda$. Este gráfico recoge la esencia de lo expuesto en los apartados precedentes, siendo χ_c el número de ondas a partir del cual los modelos LES modelan los parámetros del fluido². Aún así, se puede decir que en RANS el objetivo es el de aumentar la resolución espacial por medio de un promedio en el tiempo, la resolución espacial por ende puede ser muy grande. Por el contrario LES sacrifica resolución espacial para obtener resolución temporal y no hay necesidad de un promedio en el tiempo.

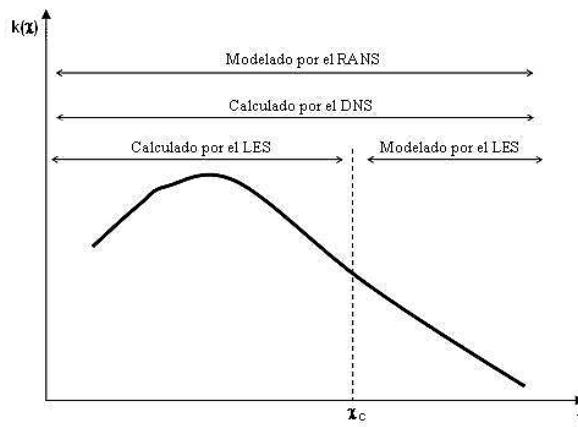


Figura 2. Espectro de la energía cinética de la turbulencia

FIRE DYNAMICS SIMULATOR. INFLUENCIA DEL COEFICIENTE DE SMAGORINSKY EN LOS MSCI CON MODELO DE TURBULENCIA LES

Fire Dynamics Simulator, FDS

El Modelo de Simulación Computacional de Incendios que se empleó para llevar a cabo los trabajos es el ‘Fire Dynamics Simulator (FDS)’, versión 4²⁹, desarrollado por el Building and Fire Research Laboratory del National Institute of Standards and Technology – NIST (USA) con la colaboración del VTT Building and Transport in Finland.

FDS es un modelo de dinámica de fluidos computacional (CFD) concebido de manera específica para reproducir el fenómeno del incendio en recintos cerrados. FDS resuelve numéricamente un tipo de ecuaciones de Navier-Stokes apropiadas para baja velocidad y flujo considerado desde un punto de vista térmico con énfasis en el transporte de humo y calor derivados de incendios.

Ec. Conservación de la Masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \bar{u} = 0 \quad (18)$$

Ec. Conservación de Momentum (Navier-Stokes):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}) + \nabla \cdot \rho \bar{u} \bar{u} = -\nabla p + \rho \bar{f}_T + \nabla \cdot \tau_{ij} \quad (19)$$

Ec. Conservación Energía:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot \rho h \bar{u} = \frac{Dp}{Dt} + \dot{q}''' - \nabla \cdot \bar{q}_r + \nabla \cdot k \nabla T + \nabla \cdot \sum_l h_l (\rho D)_l \nabla Y_l \quad (20)$$

Ec. de Estado:

$$p_0 = R \rho T \sum_l \frac{Y_l}{M_l} \quad (21)$$

El algoritmo principal tiene un esquema predictivo-corrector explícito, de segundo orden de exactitud en el espacio y en el tiempo. La turbulencia es tratada por medio de la forma Smagorinsky de Simulación de Grandes Remolinos (*Large Eddy Simulation*, LES). Es posible realizar una Simulación Directa Numérica (*Direct Numerical Simulation*, DNS) si la rejilla numérica es lo suficientemente fina. LES es el modo de operación por defecto.

Para la mayoría de las aplicaciones, FDS utiliza un modelo de combustión de fracción de mezcla. La fracción de mezcla es una cantidad escalar que se define como la fracción de gas en un punto dado del campo fluido combustible. El modelo asume que esta combustión está controlada por la mezcla, y que la reacción del combustible y el oxígeno es infinitamente rápida.

La transferencia de calor por Radiación se incluye en el modelo mediante la solución de la ecuación de la transmisión por radiación para un gas gris que no se dispersa, y en algunos casos limitados empleando un modelo de banda ancha. La ecuación se resuelve utilizando una técnica similar a la de los métodos de volúmenes finitos (*Finite Volume Method*, FVM).

Influencia de la Variación de los Parámetros de Turbulencia en FDS

Como ya se ha comentado anteriormente, FDS emplea por defecto un modelo de turbulencia LES de Smagorinsky. Este modelo utiliza varias constantes que el usuario debe de seleccionar antes de realizar los cálculos.

Como se puede apreciar en las expresiones de (16), los valores que en un principio habría que seleccionar son el coeficiente de Smagorinsky (C_s), el número de Prandtl (Pr)

y el número de Schmidt (Sc). Además de estos coeficientes, el tamaño de celda tiene gran incidencia en los cálculos (afecta al ancho del filtro y esta multiplicado por C_s), ya que afecta a otros modelos que emplea FDS y al estar multiplicando a C_s tiene la misma incidencia en los resultados variar el tamaño de rejilla o variar C_s . La selección de estos coeficientes puede proporcionar una serie de incertidumbres en los resultados obtenidos³⁰.

Como demostración del efecto de la variación de estos parámetros en los resultados del modelo, se realizaron diez simulaciones variando el coeficiente de Smagorinsky ($C_s = 0.01, 0.05, 0.1, 0.14, 0.17, 0.2, 0.23, 0.26, 0.3$ y 0.35) y el ancho del filtro (a través de diferentes tamaños de celda). En la Figura 3 se muestra el dominio computacional que se empleó en este estudio, el cual tuvo unas dimensiones de 2.4 m de alto, 4.6 m de ancho y 5.2 m de largo. Como punto de comparación comentar que los valores normalmente empleados en FDS son $C_s=0.2$, $Pr=0.5$ y $Sc=0.5$, variando el tamaño de rejilla según el caso a estudio.

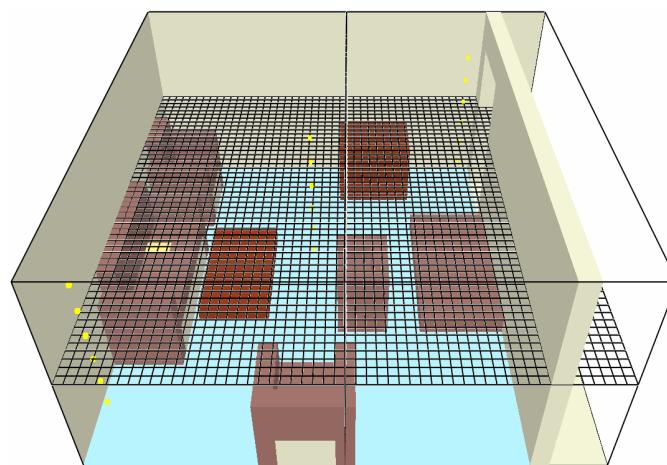


Figura 3. Escenario seleccionado para el estudio del error del modelo de turbulencia junto con la discretización espacial empleada en el plano xy

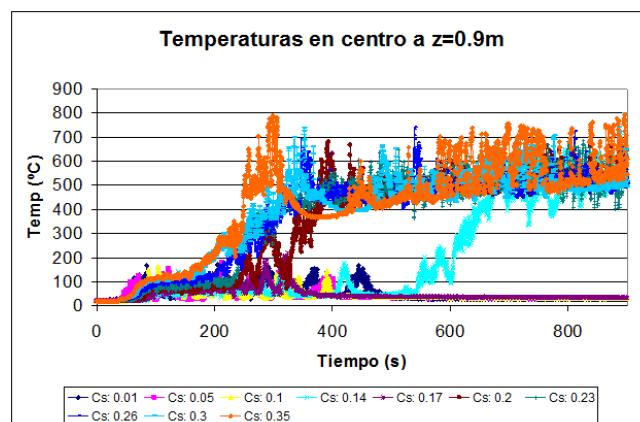


Figura 4. Temperaturas en el centro de la habitación con diferentes coeficientes de Smagorinsky

En la Figura 4 se puede observar una gráfica de la variación de la temperatura en el centro de la habitación objeto de estudio con los diferentes coeficientes de Smagorinsky seleccionados. Se puede ver que existe una gran dispersión en los resultados obtenidos, con

variaciones de hasta 630 °C en los picos de temperatura resultantes. Los peores resultados se obtienen para los índices de Smagorinsky más pequeños (0.01, 0.05, 0.1, 0.14 y 0.17), obteniéndose un valor máximo de temperatura inferior a 200 °C en todos los casos salvo cuando $C_s=0.14$ donde al final de la simulación aumenta la temperatura hasta valores similares a los reales. Los bajos valores obtenidos por estos índices son muestra de que se produce una inestabilidad numérica al introducir estos valores. Cuando $C_s=0.2$, el valor por defecto en FDS, los resultados ya son muy coherentes con el fenómeno físico que se representa, salvo en el intervalo entre 250s y 400s.

Se puede observar en la gráfica anterior que en este caso, y para este tamaño de celda, un coeficiente de Smagorinsky de 0.23 es que proporciona unos mejores valores de salida en el modelo. Un coeficiente de 0.26 daría unos valores muy similares a los obtenidos con 0.23, pero con distorsiones en algunos puntos de la curva. Los coeficientes más grandes proporcionan valores algo sobredimensionados lo que es un indicador de inestabilidad numérica.

Las Figuras 5 a 8 muestran esta variación en los resultados obtenidos mediante la visualización de la Velocidad de Cesión de Calor por unidad de volumen y de un plano de temperaturas que pasa por el centro de la fuente de ignición, en dos instantes de tiempo y para dos coeficientes de Smagorinsky distintos, 0.01 y 0.23. El desarrollo del incendio en ambos casos fue muy dispar, ya que con el coeficiente de Smagorinsky de 0.01 el incendio se encontró totalmente extinguido a los 900s mientras que con el coeficiente de 0.213 se encontraba en plena fase de desarrollo.

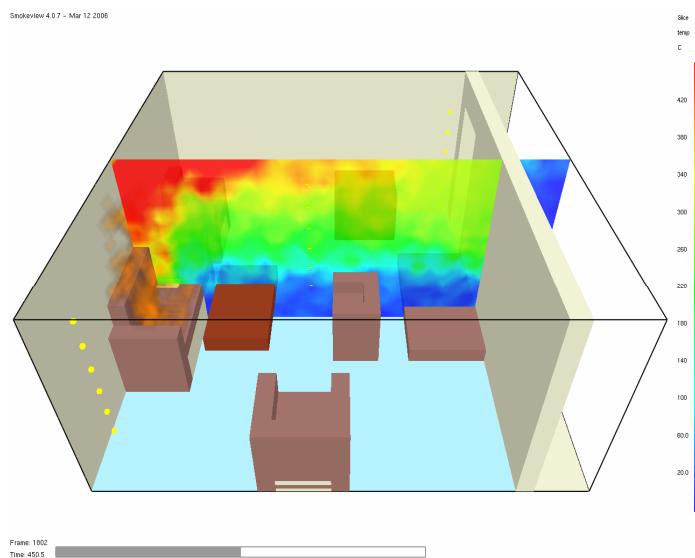


Figura 5. Visualización de la Velocidad de Cesión de Calor por unidad de volumen y de un plano central de temperaturas a los 450 s para un Coeficiente de Smagorinsky de 0.01

En análisis similares a este se comprobó que la variación en el tamaño de rejilla muestra la misma incidencia en los resultados que la variación del coeficiente de Smagorinsky. Estos resultados son coherentes con lo expuesto anteriormente, ya que la variación en el tamaño de rejilla influye en el tamaño del filtro empleado y en el cálculo de μ_{LES} . Esta variación en los resultados según los parámetros introducidos muestra la necesidad de disponer de una metodología para la selección de los mismos de forma tal que los resultados sean lo más realistas posibles.

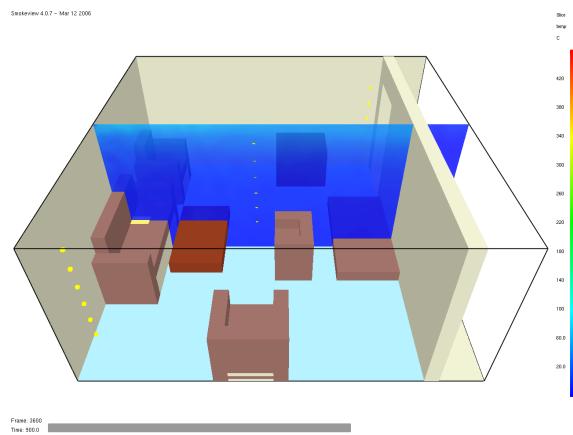


Figura 6. Visualización de la Velocidad de Cesión de Calor por unidad de volumen y de un plano central de temperaturas a los 900 s para un Coeficiente de Smagorinsky de 0.01

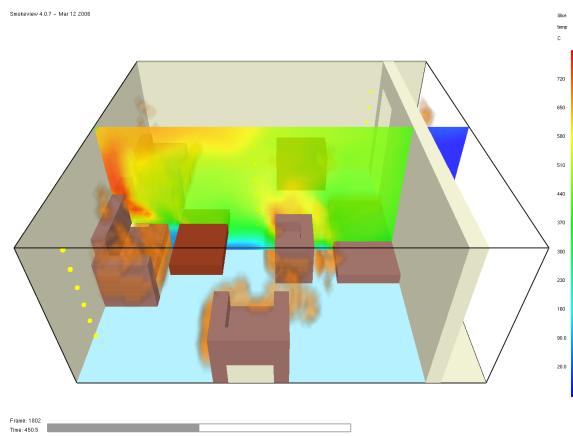


Figura 7. Visualización de la Velocidad de Cesión de Calor por unidad de volumen y de un plano central de temperaturas a los 450 s para un Coeficiente de Smagorinsky de 0.23

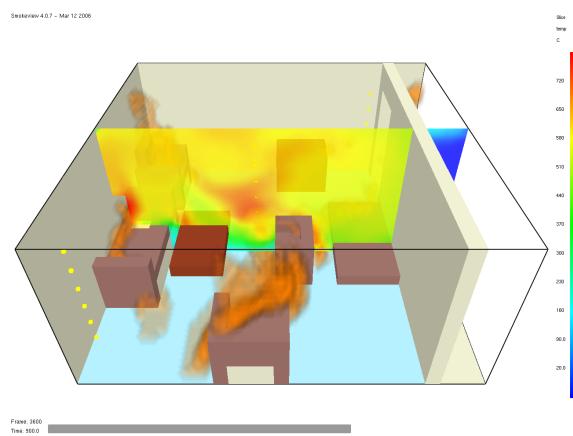


Figura 8. Visualización de la Velocidad de Cesión de Calor por unidad de volumen y de un plano central de temperaturas a los 900 s para un Coeficiente de Smagorinsky de 0.23

INFLUENCIA DEL TAMAÑO DE REJILLA EN EL MODELADO COMPUTACIONAL DE INCENDIOS

El Modelado y Simulación Computacional de Incendios con el empleo de modelos matemáticos deterministas, siempre se ha enfrentado al problema de la discretización espacial. Esto ha sido reflejo de la complejidad del fenómeno del incendio y las ecuaciones que describen los procesos físico-químicos que lo caracterizan acompañado de las limitaciones de la potencia computacional disponible en cada momento histórico de su desarrollo y en las condiciones concretas de su empleo práctico.

El análisis del grado necesario de “refinamiento” de la discretización espacial, entendiendo por ello la disminución del tamaño de las celdas (Figura 9) y, por tanto, el incremento de la cantidad de estas, continúa siendo un problema crucial en la simulación computacional de incendios, pues por mucho que se incremente la potencia computacional, esta siempre vendrá aparejada del aumento de la complejidad de los modelos y sus métodos de solución con el consiguiente incremento del tiempo necesario para el cálculo de las variables en cada celda.

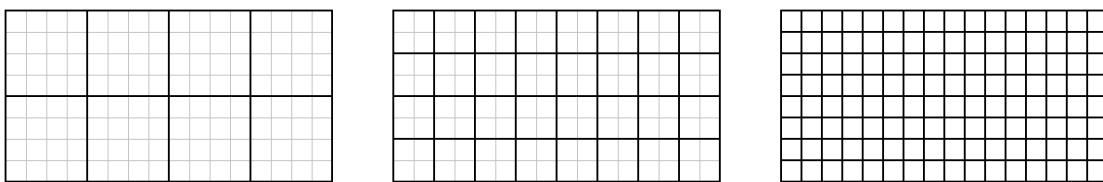


Figura 9. Diferentes tamaños de rejilla empleados para la discretización espacial

Por otra parte, el crecimiento del tiempo computacional para realizar una simulación influirá en la cantidad de casos y variantes que puedan ser analizados y, en última instancia, del costo de la simulación. Además, como es lógico, nunca decaerá el interés en lograr menores costos de las simulaciones de incendios o al menos en que estos sean justificados, lo que significa que siempre tenderemos a solucionar los modelos con la menor discretización espacial o cantidad de celdas posible, siempre que se asegure la exactitud requerida de la simulación.

Para solucionar acertadamente el problema de la determinación del grado necesario de discretización espacial en una simulación de incendios específica, deben primeramente clasificarse los errores que pueden presentarse en este tipo de simulación. Ello permitirá definir correctamente que errores son provocados o afectados por el grado de discretización espacial empleado. La taxonomía de los errores que pueden estar presentes en una simulación de incendio viene representada en la Figura 10.

De todos los errores mostrados en la Figura 10, solamente tres son influenciados o determinados por el grado de discretización espacial:

- Los errores numéricos de discretización espacial.
- Los errores de modelado físico.
- Los errores de modelado geométrico.

Los errores numéricos de discretización espacial o errores de truncamiento son aquellos que suceden por la representación de las ecuaciones diferenciales de gabinete del fluido y de otros procesos físicos como expresiones algebraicas mediante diferencias o volúmenes finitos, con el correspondiente truncamiento de los términos de orden superior.

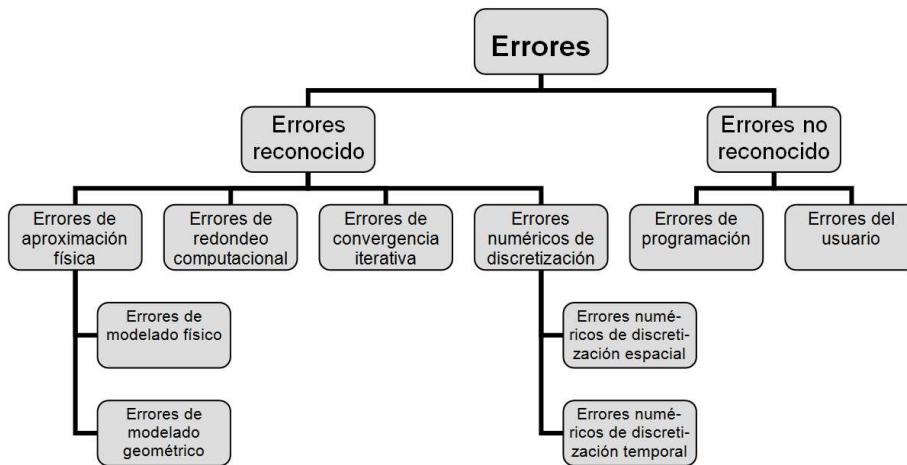


Figura 10. Taxonomía de los errores

Un método numérico coherente tenderá a la solución continua de las ecuaciones y a la eliminación del error numérico de discretización, a medida que se seleccione un mayor número de celdas y el tamaño de las mismas tienda a cero. A este efecto se le denomina convergencia de la rejilla.

Los errores de modelado físico pueden estar influenciados por el grado de discretización espacial ya que muchos de ellos basan su solución en el cálculo de variables referidas a cada celda. De hecho este enfoque lleva intrínseca la asunción de que las variables calculadas para cada instante tienen valores promediados y constantes en el interior de cada celda y por tanto el tamaño de la celda define sustancialmente el error que se comete al tomar el promedio como valor uniforme en todo el espacio intercelular. Este fenómeno se pone de manifiesto en todos los modelos de turbulencia, en los modelos de combustión, en los modelos de radiación térmica, en los modelos de la fase condensada (sólida y líquida) del escenario de incendio, etc.

Los errores de modelado geométrico vienen dados por el empleo deliberado de mallas que imposibiliten la representación de la geometría del escenario con total exactitud. Esto se refiere a la representación de todos los elementos de fase condensada del escenario (paredes, cubierta, pavimento, mobiliario y otros), sean inertes o no, las aperturas, los elementos de ventilación, etc. Dependiendo de las características concretas de la simulación, fundamentalmente del escenario y de sus propósitos, del elemento de fase sólida que se trate, incluyendo su comportamiento en el transcurso de la simulación y el área o volumen que ocupe en el dominio computacional y de la exactitud de representación geométrica, los errores de modelado geométrico pueden ser más o menos significativos.

Análisis del Error Numérico de Discretización Espacial en FDS

El análisis de los errores numéricos de discretización espacial nos permite valorar el peso específico de estos errores numéricos en el valor total del error por discretización espacial. Esto es importante ya que, en primer lugar, posibilita su aceptación o compensación y, en segundo lugar, proporciona las facilidades imprescindibles para el cálculo de los restantes tipos de errores de discretización espacial. La estrategia a seguir consiste en analizar escenarios en los que no existan o se puedan despreciar los errores de modelado físico y de modelado geométrico ocasionados por la discretización espacial. Estos escenarios deben cumplir algunos requisitos como:

- Lograr que al menos en los puntos de análisis de los errores el flujo sea prácticamente laminar para poder despreciar los errores del modelo de turbulencia.
- No incluir foco alguno de incendio para evitar la introducción de errores por parte de los modelos de combustión y radiación.
- Considerar las superficies sólidas del escenario como inertes para eliminar totalmente los errores de los modelos de fase condensada.
- Elegir las dimensiones del escenario y de las celdas en diferentes mallas durante el proceso de refinamiento de estas para que haya un ajuste perfecto con el fin de eliminar los errores de modelado geométrico.

El escenario seleccionado representó un pequeño pasillo de 4 m^2 de sección y 10 m de longitud en cuya boca de entrada se sopla aire a diferentes velocidades y temperaturas y cuya boca de salida se encuentra abierta directamente a la atmósfera. En las primeras simulaciones que se realizaron la temperatura del flujo de aire de entrada fue igual a la ambiente. Aparte de estos análisis, en la Tabla I se muestran los diferentes ensayos realizados con la inclusión de un gradiente térmico para este escenario, teniendo en cuenta que cada uno de los mismos fue simulado para tres tamaños de rejilla diferentes.

Velocidad (m/s)	2			5			10		
Temperatura (°C)	250	500	1000	250	500	1000	250	500	1000

Tabla I. Valores de los parámetros de entrada de los diferentes ensayos realizados

Los sensores de medida se situaron en las cercanías de la entrada de aire, en el centro del recinto y en las cercanías de la salida del mismo. A fin de obtener un régimen lo más laminar posible, los resultados se analizaron en el sensor de medida situado justo en el centro del escenario seleccionado, ya que los situados al inicio se vieron afectados por la corriente de aire entrante y por el gradiente de temperaturas cuando este se incluyó, y los situados a la salida también resultaron en algún caso afectados por la localización de la apertura hacia la atmósfera.

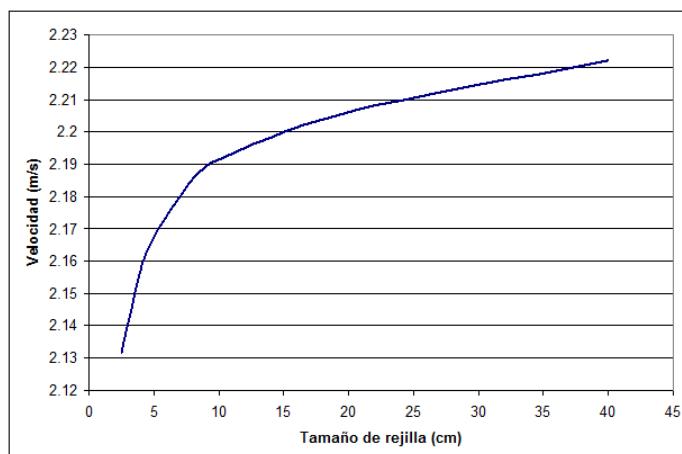


Figura 11. Variación con el tamaño de celda de la velocidad en el punto central cuando no se dispone de gradiente térmico

Como un primer análisis, se realizaron 7 simulaciones con diferentes tamaños de celda y con una velocidad de aire de entrada de 2 m/s en todos los casos. Para simplificar en este caso no se tuvo en cuenta el gradiente térmico. Los resultados obtenidos de la velocidad (Figura 11) siguen una convergencia hacia un valor que, teóricamente, será el valor real, ya que como se comentó anteriormente estos errores de truncamiento tienden a desaparecer a medida que se reduce el tamaño de rejilla. Este valor se puede obtener aplicando diferentes métodos, entre ellos la Extrapolación de Richardson tal y como expone Roache^{31–33} para el caso de modelos CFD.

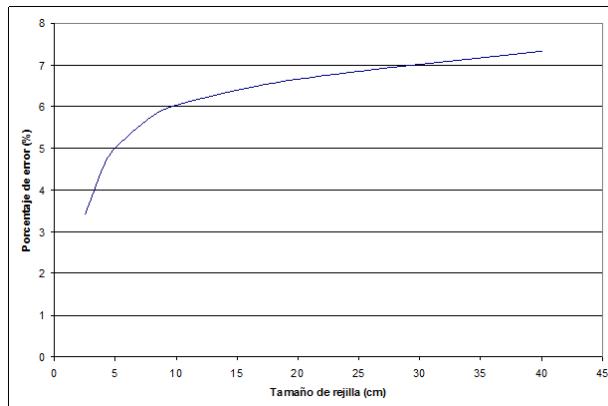


Figura 12. Variación del error relativo con el tamaño de celda

En la Figura 12 se muestra la dependencia del error relativo de la velocidad δu del índice de refinamiento de la malla, r :

$$\delta u = \frac{|u_i - u_0|}{|u_0|} 100 \% \quad (22)$$

$$r = \sqrt[3]{\frac{\delta x_i \cdot \delta y_i \cdot \delta z_i}{\delta x_0 \cdot \delta y_0 \cdot \delta z_0}} \quad (23)$$

donde:

u_i – velocidad del flujo para la i-ésima dimensión de celda,

u_0 – valor real de la velocidad del flujo según el método de extrapolación de Richardson,

$\delta x_i, \delta y_i, \delta z_i$ – dimensiones de la celda de la i-ésima malla,

$\delta x_0, \delta y_0, \delta z_0$ – dimensiones de la celda del mallado más fino empleado en la investigación.

Como se observa, los errores numéricos de discretización espacial para índices de refinamiento de malla iguales a 4 no exceden el 7.5 %.

A fin de poder comprobar la influencia de la velocidad del flujo de entrada en los resultados obtenidos se amplió el análisis anterior con ensayos para otras dos velocidades aplicando los mismos tamaños del mallado. Este análisis previo a la introducción de gradientes de temperatura proporcionó resultados similares a los mostrados anteriormente, siguiéndose, como era de esperar, una convergencia al valor real a medida que se reduce el tamaño de la celda.

Una vez realizados estos estudios previos se procedió a la inclusión de los gradientes térmicos. Para ello las corrientes de aire introducidas en la entrada tuvieron una temperatura que siguió una curva tal que a los 60 s (10 % de la simulación) se alcanzó el 90 % de su pico, obteniéndose el mismo a los 600 s de la simulación. De estos 27 ensayos se eliminaron aquellos casos en los que se observó la aparición de cierta turbulencia, a fin de poder analizar un régimen predominantemente laminar.

En la Figuras 13 y 14 se observa la tendencia de convergencia a un cierto valor de temperatura, tal y como se había observado anteriormente para el caso de la velocidad. Además en este caso se puede comprobar que el error obtenido, disminuye de forma considerable a medida que la estabilidad del flujo es mayor, obteniéndose valores muy similares de temperatura en los casos extremos para diferentes tamaños de celda.

Al convertirse el flujo en turbulento se observan errores dispersivos considerables que ocasionan fluctuaciones temporales significativas en todas las variables de salida, tanto locales como globales.

Esto, a priori, solo puede deberse o al modelo de turbulencia empleado, en particular al modelo LES en la variante propuesta por Smagorinsky o al método de resolución empleado por FDS.

Los estudios realizados sobre los errores numéricicos de discretización espacial identifican el carácter convergente del proceso de refinamiento de la malla y nos indican a pensar en la influencia ocasionalmente compensada que pueden tener los restantes tipos de errores de discretización espacial, lo que explicaría los resultados contradictorios presentados en diversos trabajos^{29,34} donde mallas más finas arrojan peores resultados.

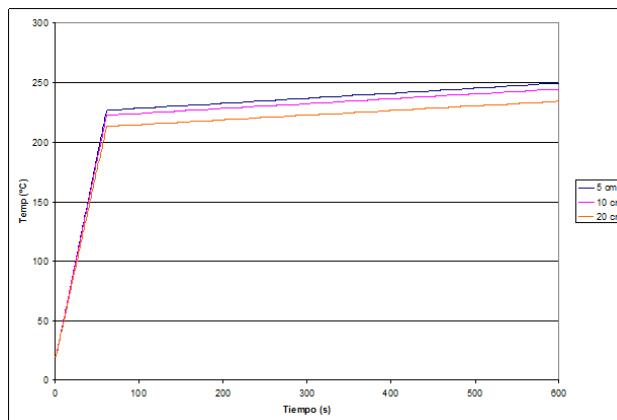


Figura 13. Comparación de las Temperaturas obtenidas en el Punto 3 para un pico de entrada de 250°C y una Velocidad del Flujo de 10 m/s

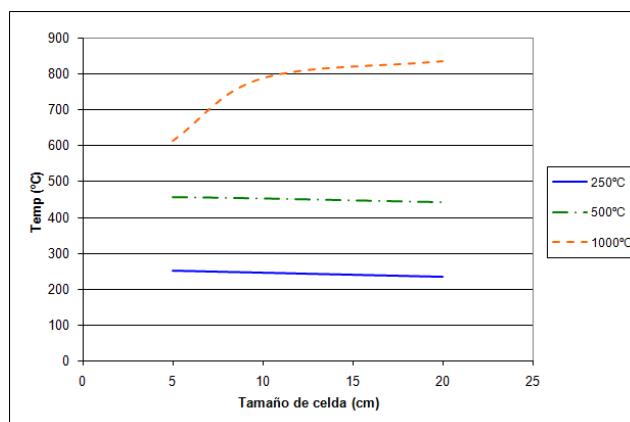


Figura 14. Variación con el Tamaño de Celda del valor de la Temperatura en el Punto 3 para una Velocidad del Flujo de entrada de 10 m/s

CONCLUSIONES

De lo expuesto anteriormente se infiere la importancia de disponer de una metodología para la evaluación de los diferentes errores existentes en los modelos de simulación computacional de incendios a fin de poder identificarlos y posteriormente reducirlos e incluso eliminarlos. En estos momentos los autores de la presente ponencia están definiendo esta metodología cuyo punto fundamental es la necesidad de realizar el análisis de cada uno de los tres tipos de errores de discretización de forma individualizada a fin de poder calcular la incidencia real de los mismos en los resultados de la simulación. Este estudio por separado de los errores es necesario ya que los diferentes errores pueden compensarse entre sí, con lo que el error final es engañoso a la hora de poder hacer un análisis correctivo de los mismos.

Tal y como se ha visto para el caso del error numérico de discretización espacial, el tratamiento de los errores de forma individualizada permite conocer la ponderación de este dentro del total, observándose en todos los casos, y tal y como era de esperar, la convergencia de los valores obtenidos a un valor real a medida que se reduce el tamaño de rejilla.

En el análisis del modelo LES se expuso la variante de Smagorinsky como submodelo principal, señalando sus deficiencias. Nótese que los submodelos restantes tienden a subsanar la principal deficiencia de Smagorinsky: la inexactitud del coeficiente C_s . Esta inexactitud viene dada por la ausencia de criterios matemáticos para la elección del tamaño de celda.

Una vez que se introducen los modelos de turbulencia en el estudio, es conveniente realizar un análisis del coeficiente C_s para un mismo mallado y juzgar si aumenta o disminuye la fluctuación respecto de datos de ensayos reales o datos obtenidos con un modelo DNS. De esta forma se podrá conseguir discernir la influencia de este tipo de errores.

REFERENCIAS

- 1 A.N. Kolmogorov, "The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers", *Doklady Akademii Nauk SSSR Proceedings of the Academy of Sciences of the USSR*, Vol. **30**, pp. 299-303, (1941).
- 2 T. Poinsot y D. Veynante, "Theoretical and Numerical Combustion", 2nd Ed. Edwards, Philadelphia, (2005).
- 3 J.H. Ferziger y M. Peric, "Computational Methods for Fluid Dynamics", Springer – Verlag, Berlin, (2002).
- 4 D.C. Wilcox, "Turbulence Modeling for CFD", DCW Industries, Inc., (1998).
- 5 A. Favre, "Statistical equations of turbulent gases", *Problems of hydrodynamics and continuum mechanics*, SIAM, Philadelphia, pp. 231-266, (1969).
- 6 J. Boussinesq, "Théorie de l'Écoulement Tourbillant", Mem. Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr., Vol. **23**, pp. 46-50, (1877).
- 7 L. Prandtl, "Investigations on turbulent flow", *Zeitschrift fur angewandte Mathematik und Mechanik*, Vol. **5**, p. 136, (1925).
- 8 B.S. Baldwin y H. Lomax, "Thin layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows", *AIAA Paper*, pp. 78-257, (1978).
- 9 P.S. Granville, "Baldwin-Lomax factors for turbulent boundary layers in pressure gradients", *AIAA Journal*, Vol. **25**, N° 12, pp. 1624-1627, (1987).

- 10 A.M.O. Smith y T. Cebeci, "Numerical solution of the turbulent boundary layer equations", Douglas aircraft division report DAC 33735, (1967).
- 11 B.S. Baldwin y T.J. Barth, "A one-equation turbulence transport model for high Reynolds number wall-bounded flows", NASA TM 102847, (1990).
- 12 P.R. Spalart y S.R. Allmaras, "A one-equation turbulence model for aerodynamic flows", *AIAA Paper*, pp. 92-0439, (1992).
- 13 P.R. Spalart y S.R. Allmaras, "A one-equation turbulence model for aerodynamic flows", *La Recherche Aerospatiale*, N° 1, pp. 5-21, (1994).
- 14 W.P. Jones y B.E. Launder, "The prediction of laminarization with a 2-equation model of turbulence", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, N° 15, p. 301, (1972).
- 15 V. Yakhout y S.A. Orszag, "Renormalization Group Analysis of Turbulence: 1. Basic Theory", *Journal of Scientific Computing*, Vol. **1**, pp. 3-51, (1986).
- 16 V. Yakhout, S.A. Orszag *et al.*, "Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique", *Physics of Fluids A*, Vol. **4**, pp. 1510-1520, (1992).
- 17 D.C. Wilcox, "Re-assessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models", *AIAA Journal*, Vol. **26**, N° 11, pp. 1299-1310, (1988).
- 18 F.R. Menter, "Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications", *AIAA Journal*, Vol. **32**, pp. 269-289, (1994).
- 19 P. Durbin, "Separated flow computations with the $k - \varepsilon - \bar{v}^2$ model", *AIAA Journal*, Vol. **33**, pp. 659-664, (1995).
- 20 M. Popovac y K. Hanjalic, "Compound wall treatment for RANS computation of complex turbulent flows and heat transfer, *Flow, Turbulence and Combustion*", DOI 10.1007/s10494-006-9067-x, (2007).
- 21 B.E. Launder, G.J. Reece y W. Rodi, "Progress in the development of a Reynolds-stress turbulent closure", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. **68**, N° 3, pp. 537-566, (1975).
- 22 J. Smagorinsky, "General circulation experiments with the primitive equations, I. The basic experiment", *Monthly Weather Review*, Vol. **91**, N° 3, PP. 99-164, (1963).
- 23 J. Bardina, J. Ferziger y W. Reynolds, "Improved subgrid models for large eddy simulation", *AIAA Paper*, PP. 80-1357, (1980).
- 24 M. Germano, U. Piomelli, P. Moin y W.H. Cabot, "A dynamic sub-grid scale eddy viscosity model", *Physics of Fluids*, vOL. **A**, N° 3, pp. 1760-1765, (1991).
- 25 M. Lesieur y O. Metais, "New trends in large-eddy simulations of turbul.", *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. **28**, pp. 45-82, (1996).
- 26 M. Lesieur, "Recent approaches in large-eddy simulations of turbulence", *New tools in turbulence modelling*, pp. 1-28, Les Editions de Physique – Springer Verlag, (1997).
- 27 P.R. Spalart, W.H. Jou, M. Strelets y S.R. Allmaras, "Comments on the Feasibility of LES for Wings and on the Hybrid RANS/LES Approach", *Adv. in DNS/LES, Proceed. of the First AFOSR International Conference on DNS/LES*, (1997).
- 28 M. Strelets, "Detached Eddy simulation of massively separated flows", *AIAA*, pp. 2001-0879, (2001).

- 29 K. McGrattan, “*Fire Dynamics Simulator (Version 4): Technical Reference Guide*”, NIST Special Publ. 1080, (2006).
- 30 N. Pope y C. Bailey, “Modelling of compartment fires: analysis of the importance of grid resolution and sub-grid-scale constants in the validation of FDS”, *International Congress about Computational Simulation Models in Fire Engineering and Research*, Santander, Spain, (2004).
- 31 NPARC Alliance, “Tutorial on CFD Verification and Validation”, Web.Site: <http://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/tutorial/tutorial.html>, (2005).
- 32 P.J. Roache, “*Verification and Validation in Computational Science and Engineering*”, Hermosa Publishers, Alburquerque, New Mexico, (1998).
- 33 P.J. Roache, K. Ghia y F. White, “Editorial policy statement on the control of numerical accuracy”, *ASME Journal of Fluids Engineering*, Vol. **108**, N° 1, (1986).
- 34 D. Toris, C. Rogsch y A. Seyfried, “*Usefullness of Finer Grid to Increase the Approximation Quality of LES-Based Cfd-calculations Related to Buoyancy-driven Flows*”, Interflam 2007, London, (2007).