D. Alvear J. A. Capote G. Rein J. L. Torero M. Lázaro O. V. Abreu

MODELADO Y SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE INCENDIOS EN LA EDIFICACIÓN



Reservados todos los derechos.

«No está permitida la reproducción total o parcial de este libro, ni su tratamiento informático, ni la transmisión de ninguna forma o por cualquier medio, ya sea electrónico, mecánico por fotocopia, por registro u otros métodos, sin el permiso previo y por escrito de los titulares del Copyright.»

Ediciones Díaz de Santos. E-mail: ediciones@diazdesantos.es Internet: http://www.diazdesantos.es/ediciones

Grupo GIDAI – Universidad de Cantabria Avda. los Castros, s/n. 39005 SANTANDER E-mail: gidai@unican.es Internet: http://grupos.unican.es/GIDAI

ISBN: 978-84-7978-832-2 Depósito legal: M. 43.530-2007

Diseño de cubierta: Ángel Calvete Fotocomposición: Fer. Impresión: Edigrafos. Encuadernación: Rústica-Hilo.

Impreso en España

Autores

Daniel Alvear, Doctor Ingeniero Industrial por la Universidad de Cantabria. Investigador contratado de la Universidad de Cantabria, Coordinador de la Línea de Investigación del Grupo GIDAI – Seguridad contra Incendios – Investigación y Tecnología.

Guillermo Rein, Doctor por la Universidad de Berkeley-California. Lecturer de la University of Edinburgh, investigador del BRE/Fire Research Centre (fundación creada por la Real Academia de UK y el Instituto de Investigación BRE-Building Research Establishment).

Jorge A. Capote, Doctor Ingeniero de Caminos, Canales y Puertos por la Universidad de Cantabria. Profesor Titular de la Universidad de Cantabria, Director del Grupo GIDAI – Seguridad contra Incendios – Investigación y Tecnología.

José L. Torero, Doctor por la Universidad de Berkeley-California. Professor de la University of Edinburgh, Director del BRE/Fire Research Centre (fundación creada por la Real Academia de UK y el Instituto de Investigación BRE-Building Research Establishment).

Mariano Lázaro, Ingeniero Industrial por la Universidad de Cantabria. Doctorando e investigador contratado de la Universidad de Cantabria, investigador del Grupo GIDAI –Seguridad contra Incendios – Investigación y Tecnología.

Orlando Abreu, Doctor en ciencias Técnicas por la Universidad de Minsk, Bielorrusia. Investigador-colaborador del Grupo GIDAI – Seguridad contra Incendios – Investigación y Tecnología de la Universidad de Cantabria.

Índice

Autores	VII
Índice	IX
Prólogo	XIII
Presentación	XVII
CAPÍTULO 1. PRINCIPIOS DE LA DINÁMICA DEL INCENDIO	1
1.1 El proceso de combustión	1
1.1.1 Fisicoquímica de la combustión	3
1.1.2 Transferencia de calor	5
1.2 Fases del crecimiento del incendio	6
1.2.1 Factores que afectan al desarrollo del incendio	10
1.2.2 Condiciones necesarias para el <i>flashover</i>	13
1.3 La velocidad de cesión de calor: parámetro clave para caracterizar la	
combustión de un material	19
1.3.1 Velocidad de cesión de calor	19
1.3.2 Propagación de llama	21
CAPÍTULO 2. PRINCIPIOS DEL MODELADO Y SIMULACIÓN	
COMPUTACIONAL DE INCENDIOS	25
2.1 Definiciones y conceptos	25
2.1.1 Conceptos Básicos del MSCI	26
2.1.2 El modelado como vehículo del análisis del incendio	27
2.1.2 Tinos generales de modelos	28
2.1.4 Simulaciones de incendios	29
2.2. Fl ciclo de vida	32
2.2 El ciclo de vida de un modelado y simulación	52
computacional	33
2.2.2 Propuesta de un modelo de ciclo de vida del MSCI	35
2 3 Verificación v validación	39
2 3 1 Procesos y actividades básicas de la verificación y validación	40
2.3.2 Técnicas de la verificación y la validación	43
	rJ

CAPÍTULO 3. MODELOS DE SIMULACIÓN COMPUTACIONAL

DE INCENDIOS	47
3.1 Características y tipos de MSCI	47
3.2 Modelos de zona	50
3.2.1 Principios Físicos de los Modelos de Zona	50
3.2.2 Ecuaciones de conservación	56
3.2.3 Ecuación de conservación de la masa	58
3.2.4 Ecuación de conservación de las especies	64
3.2.5 Ecuación de conservación de la energía	65
3.3 Modelos de campo	68
3.3.1 Ecuación de conservación de la masa	69
3.3.2 Ecuación de conservación de las especies	70
3.3.3 Ecuación de conservación del momento (de la cantidad de movimiento).	72
3.3.4 Técnicas para el tratamiento de la turbulencia	81
3.3.5 Ecuación de conservación de la energía	90
3.3.6 Ecuación de estado y métodos numéricos de solución del modelo	95
3.3.7 Modelos de combustión	98
3.3.8 Modelo de radiación térmica	116
3.3.9 Condiciones térmicas de contorno	116
3.4 Ventajas y desventajas de los MSCI	123

CAPÍTULO 4. EJEMPLOS Y APLICACIONES DE LOS MODELOS

125
125
127
129
130
131
133
139
139
142
149
155
155
158
167

CAPÍTULO 5. EJEMPLOS Y APLICACIONES DE LOS MODELOS DE CAMPO	17
5.1 Situación actual de los modelos de campo	17
5.2 Introducción al empleo de 'Fire Dynamics Simulator' (FDS)	17
5.2.1 Introducción al modelo 'Fire Dynamics Simulator'	18
5.2.2 Avances de la nueva versión del modelo FDS	18
5.2.3 Creación de ficheros de entrada en FDS	18
5.2.4 Ficheros de salida y postprocesador gráfico	20
5.2.5 Análisis de sensibilidad en FDS	21
5.2.6 Ejemplos y aplicaciones del Modelo FDS en escenarios sencillos y objetivos limitados	21
5.2.7 Ejemplos de aplicaciones complejas	23
CAPÍTULO 6. INTRODUCCIÓN AL MODELADO Y SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DEL COMPORTAMIENTO HUMANO EN CASO DE EMERGENCIA	24
6.1 Principios del modelado del comportamiento de las personas en caso	2.4
de emergencia	24
6.1.1. Introducción	24
6.1.2. Factores principales en el modelado de evacuación	24
6.1.3. Cálculos de flujo hidráulico	24
6.2 Tipos de modelos de evacuación	25
6.2.1 Modelos de movimiento	25
6.2.2 Modelos de comportamiento	25
6.2.3 Modelos de comportamiento parcial	25
6.3 Ventajas y limitaciones de los modelos de evacuación	25
6.4 Ejemplos de aplicacion de los modelos de evacuacion en escenarios	25
sencinos y objetivos limitados: STEPS, SIMULEA, EVACINET4	25
0.4.1 Modelo STEPS	25
6.4.2 Modelo SIMULEA	23 26
6.4.4 Descripción físico de la estación tine objete de estudio	20
6.4.5 Modelade de avecueción con STEDS	20
6.4.6 Modelado de evacuación con SILLES	27
6.4.7 Modelado de evacuación con EVACNETA	21 28
	20
BIBLIOGRAFÍA	28
ÍNDICE ANALÍTICO	29

Prólogo

Los últimos años han ofrecido notables progresos en el modelo de inicio y propagación del fuego en los diferentes compartimentos que forman parte de un edificio: habitaciones, corredores, escaleras, etc. Estos avances se han debido al desarrollo de métodos numéricos capaces de resolver las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía en flujos turbulentos. Asimismo, se han desarrollado ordenadores de gran velocidad y capacidad. Puede afirmarse que este espacio de actividad se inició al término de los años setenta del siglo pasado. Buena contribución a este fin hizo el que era entonces el National Bureau of Standards (ahora National Institute for Standard and Technology, NIST), en Maryland, EE UU. Tuve la suerte de participar en estos comienzos cuando, a la sazón, era Post-Doctoral Fellow en la Universidad de Harvard donde trabajaba con el profesor Howard Emmons, el principal iniciador y fuerza propulsora de este movimiento. Aunque, en estos comienzos el objetivo fundamental se limitaba a la resolución de la ecuación de la energía en un compartimento en el que ya se había iniciado un incendio, las expectativas eran prometedoras, y la dinámica de trabajo para el futuro, muy interesante y activa. La ecuación, por entonces, había sido reemplazada por lo que se denominó un Zone Model (modelo de zona) en el que el volumen del gas se separaba en dos capas: una caliente, contenida en la parte superior del compartimento, y otra fría en la parte inferior, con un intercambio de calor y masa entre las dos zonas y con escape al exterior de gases calientes procedentes de la capa superior, así como entrada de gases fríos originados en la capa inferior. Este modelo de zona produjo lo que se llamó el «Harvard I» que puede considerarse el pionero del modelado computacional de incendios. Este modelo fue seguido por otros más avanzados y de fácil uso como el CFAST, desarrollado en NIST que, de forma más precisa, incorporaba aspectos diferentes sobre la propagación del fuego y permitía una predicción más completa de sus consecuencias, particularmente en cuanto a la transmisión del calor, así como a la circulación de los productos de combustión a través del edificio.

A principios de los ochenta comenzó el desarrollo de lo que se conoció como *Field Models* (modelos de campo) en los que las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía se resolvían en forma diferencial, aunque las limitaciones de computación obligaban al uso de estos modelos en compartimentos muy reducidos. Nosotros, por ejemplo, (yo estaba ya en Berkeley) desarrollamos modelos de campo que simulaban la propagación de fuego en compartimentos de unos diez centímetros. Aunque estos modelos no eran realistas dado el tamaño del compartimento, permitían describir en detalle cómo se iniciaba un fuego, así cómo su propagación en una habitación.

En cualquier lugar, estos modelos fueron progresando y evolucionando hasta los modelos de campo actuales, como el JASMINE, desarrollado en el Reino Unido y el FDS en los EE UU. Estos modelos han alcanzado un nivel de desarrollo tan importante que, en la actualidad, se

usan en compañías de ingeniería y arquitectura para hacer el diseño que permita afianzar el nivel de seguridad contra incendios en edificios. Se han empleado también para describir el desarrollo de incendios tan importantes como los ocurridos en el World Trade Center en Nueva York o en el edificio Windsor en Madrid.

En los países de habla hispana se ha producido en la última década un impulso significativo en el empleo de los modelos computacionales de simulación de incendios en la edificación y en los medios de transporte. Un grupo que ha pasado al liderazgo en este campo es el Grupo GIDAI de la Universidad de Cantabria, al que pertenecen muchos, la mayoría de los autores de este libro. He tenido la suerte de asistir al desarrollo del grupo desde casi sus inicios, y he observado la influencia que vienen teniendo en la aplicación de los modelos computacionales de incendio en España. La visión y el liderazgo del profesor Jorge Capote ha sido fundamental y es esencial para este desarrollo.

A pesar de que una gran cantidad de artículos se habían escrito sobre la temática del modelado y simulación computacional de incendios, ciertamente, hasta el momento no se había publicado un libro que permitiera una visión actual de los progresos de este campo que sirviera de referencia al técnico encargado de diseñar la seguridad contra incendios en edificios y en el transporte. Tampoco había un libro que permitiera describir la causa de fuegos accidentales. Esta obra cubre una necesidad que era evidente en el área de la simulación de fuegos. Además, es importante que, al estar escrito en español, el libro sea la primera referencia disponible en este idioma para los técnicos del fuego del mundo hispano. Se trata de un trabajo que refleja la experiencia de los autores en el modelado de fuegos, y que incluye, además de los profesores e investigadores de la Universidad de Cantabria, también de la Universidad de Edimburgo en el Reino Unido. Ambas instituciones a la cabeza del estudio del fuego en Europa.

La obra se divide en dos partes: por un lado aparece la presentación de los fundamentos del fuego y los modelos computacionales, por otra, la aplicación práctica y aprendizaje de estos. El *primer capítulo* destaca los fundamentos de la dinámica del incendio y sirve a manera de introducción al objetivo primordial del libro, que es el entendimiento de este fenómeno fisicoquímico. Es imprescindible el conocimiento de los dos mecanismos fundamentales que controlan el fuego: la combustión y transmisión de calor, a los efectos del buen entendimiento de un incendio. Estos fundamentos hacen posible la explicación de las diferentes fases de crecimiento de un incendio desde la ignición y propagación, al *flashover* o la extinción. El *segundo capítulo* introduce los caracteres conceptuales de los modelos computacionales en general y el procedimiento para usarlos correctamente para el análisis ingenieril, pasando por todas sus fases de desarrollo. Nunca se repetirá suficientemente la importancia de la verificación y la validación de estos modelos para asegurarnos sobre la correcta simulación de un fenómeno tan complejo como el fuego.

El *tercer capitulo* nos presenta los diferentes modelos de simulación de incendios y sus principios. Los modelos de zona agrupan y resuelven los mecanismos más elementales de un incendio. La presentación de sus ecuaciones de conservación sirve para exponer más detalladamente la dinámica del fuego. Los modelos de campo, con sus complicadas técnicas matemáticas para el tratado de la turbulencia, la combustión y la radiación, pueden llegar a ser vistos como «cajas negras» por el usuario, pero son de enorme importancia para la ciencia y para la ingeniería en el futuro. El estudio concede énfasis a los modelos LES, que son, tal vez, los mas usados. Es aquí donde los autores revelan mayor experiencia. Los tres capítulos siguientes presentan ejemplos y aplicaciones de CFAST (Capítulo 4), FDS (Capítulo 5) y modelos de evacuación (Capítulo 6). Esta segunda parte del libro tiene la doble finalidad de servir como manual en castellano y también como guía para el aprendizaje con ejemplos que van desde aplicaciones sencillas hasta usos en edificaciones más complejas y realistas.

> A. CARLOS FERNÁNDEZ-PELLO Catedrático del Departamento de Ingeniería Mecánica Universidad de Berkeley, California, EE UU Miembro de la Real Academia de Ingeniería de España

El desarrollo científico sobre los procesos fisicoquímicos relacionados con los incendios y sus modelos matemáticos, y el avance considerable e ininterrumpido de la potencia computacional posibilitan la resolución de problemas cada vez más complejos y que son de aplicación en diferentes ámbitos de la Seguridad contra Incendios, tales como, la Ingeniería de Diseño, el Análisis Forense y la Investigación científica.

El presente trabajo surgió de la necesidad de contar con un texto sobre este novedoso campo para los alumnos de las asignaturas de *Ingeniería de la Seguridad contra Incendios y Explosiones y Modelado y Simulación Computacional de Incendios en la Edificación*, que desde hace varios años se imparten para los últimos cursos de las carreras de ingeniería, y *Modelado y Simulación Computacional de Incendios* en la formación de postgrado en la Universidad de Cantabria.

El libro, además pretende servir de introducción en la temática a los profesionales y técnicos que de forma creciente la emplean en el desempeño del ejercicio profesional, debido especialmente a las escasas referencias disponibles en español, pero sin suplantar los valiosos textos existentes ni las obligadas referencias bibliográficas.

Un objetivo prioritario de esta publicación es presentar de forma resumida los fundamentos que permiten definir y precisar conceptos, delimitando su alcance y aplicación, y al mismo tiempo que introducir al lector en los principios del modelado y simulación computacional de incendios y proporcionar ejemplos de aplicación.

Este libro no hubiera sido posible sin la colaboración directa e indirecta de muchos especialistas y colegas del amplio mundo del modelado y simulación computacional de incendios, en especial queremos expresar nuestro reconocimiento a los investigadores de los centros de investigación, universidades y empresas que se esfuerzan en mejorar los conocimientos de la Ciencia y Tecnología del Incendio y en desarrollar modelos tan avanzados como los que se exponen. principal mecanismo de flujo entre las capas de gas estratificadas inferior y superior.

Se ha llevado a cabo un trabajo considerable para desarrollar las relaciones de arrastre para incendio de balsa (*pool fire*) o incendios de mecheros de gas axisimétricos.

Desafortunadamente, tanto los modelos de penacho teóricamente ideales como las correlaciones basadas en datos varían mucho, y no existe consenso entre los modelos de zona en práctica para el modelo de arrastre de incendio en piscina. Rockett ha realizado las variaciones de resultados que encontró utilizando distintos modelos de arrastre de fuego. Encontró que la altura de la capa, la velocidad de arrastre y la temperatura del gas de las capas variaban aproximadamente con un valor de dos entre distintos modelos.

Se necesitan claramente datos más útiles en lugar de modelos matemáticos ideales para resolver el tema de la precisión para un incendio de balsa simple. Aún incluso cuando no se necesita una relación de arrastre perfecta para un incendio de balsa axisimétrico en un modelo de zona, porque un penacho en un compartimento puede estar sujeto a flujos de aire no simétricos que pueden curvar el penacho, y por tanto afectar a su velocidad de arrastre. Normalmente los efectos del viento incrementarán la velocidad de arrastre.

Rockett mostró que el efecto del modelo de arrastre es crucial para predecir el desarrollo del incendio. Esto sugiere que el modelo de arrastre debe ser representativo del objeto real que se quema. Sin embargo no existe modelo de arrastre para una pared, esquina u objeto de mobiliario; esto dramatiza la carencia de investigación muy necesaria en este tema.

3.2.3.1 Flujos de ventilación a través de aberturas en particiones verticales

La representación clásica de un incendio en una habitación o edificación representa la estructura con una abertura como una puerta o ventana hacia el ambiente de los alrededores, se han discutido flujos de incendio inducidos a través de este tipo de aberturas se han discutido y existe un modelo ampliamente aceptado para calcular estos flujos basados en la distribución de temperatura de los gases en cada lado de la abertura.

Las bases teóricas de la computación son el flujo por orificio utilizando la ecuación de Bernoulli a lo largo de una línea de corriente, como se ilustra en la Figura 3.4 La velocidad en el emplazamiento 3, V_g viene dada por la ecuación

$$\nu_g = \sqrt{\frac{2h_u(\rho_a - \rho_g)g}{\rho_g}}$$
[33]

donde se asume que V_1 es cero. La velocidad del flujo de masa se calcula mediante la integración sobre un área de flujo de ancho W y altura z utilizando la siguiente ecuación

$$\dot{m} = C_d \int_0^z W \rho_g v(z) dz$$
[34]



Figura 3.4 Flujo a través de una abertura (Fuente: *Enclosure fire dynamics*, Björn Karlsson, James G. Quintiere⁽²⁾).



Figura 3.5 Flujos a través de ventilaciones típicos (Fuente: *Enclosure fire dynamics*, Björn Karlsson, James G. Quintiere⁽²⁾).

donde C_d es un coeficiente de flujo. Emmons sugiere que un valor de 0,68 para C_d tiene una precisión de +10% excepto para velocidades de flujo muy pequeñas en el comienzo de un fuego⁽⁴¹⁾. En general, C_d dependerá del número de Reynolds.

La Figura 3.5 representa dos ejemplos de flujos de ventilación a través de una abertura en una partición vertical. En ambos casos se aplican las ecuaciones anteriores, pero las distribuciones de presión deben describirse apropiadamente. Por ejemplo, el caso de convección natural pura mostra-



Figura 3.6 Diferencia de presión vertical a través de una partición vertical en habitación comparada con una computación basada en la distribución de temperatura del fuego en la habitación y una aproximación del modelo de zona de dos temperaturas utilizando la suposición de presión hidrostática (de Quintiere) (Fuente: *Enclosure Fire dynamics*, Björn Karlsson, James G. Quintiere⁽²⁾).

do en la Figura 3.5, la presión se determina mediante la presión estática con respecto a la presión en el suelo, P(0). En realidad es la presión en el suelo la que se aplica en la ecuación [25] y en la ecuación de estado de gas ideal.

La suposición está entonces en que las velocidades de flujo son pequeñas comparadas con las velocidades de flujo en las aberturas para justificar el cálculo de presión estática.

Entonces, la distribución de presión vertical en cada lado de la abertura se calcula como McCaffrey y Rockett⁽⁴²⁾ y se ilustra en la Figura 3.6 El signo de la diferencia de presión a través de la abertura determina la dirección del flujo.

Emmons ⁽⁴¹⁾ presenta las ecuaciones generales que permite que este cálculo se incluya en un modelo de zona. Es el más preciso de los submodelos, y proporciona la base para unir habitaciones en un modelo de zona para permitir cálculos de crecimiento de incendio y humo para una habitación grande.

3.2.3.2 Flujos de ventilación a través de aberturas en particiones horizontales

El flujo a través de una abertura horizontal se puede considerar de forma similar a la partición vertical, suministrando la diferencia de presión. Si

sólo hay una única abertura hacia el compartimento de incendio a través de una partición horizontal, como un techo, el flujo debe ser considerado oscilatorio o bidireccional. Este último caso implica una diferencia de presión cero con la gravedad, determinando el flujo.

3.2.3.3 Mezcla entre las capas

El intercambio primario de fluido entre las capas de gas inferior y superior se debe al efecto flotante del penacho del incendio. Secundaria, pero significativamente, los procesos de mezcla pueden ocurrir debido a otros efectos (Figura 3.7)

- 1. Intercambio debido a un flujo frío inyectado en la capa caliente.
- 2. Intercambio debido al mezclado transversal asociado con los flujos de ventilación.
- 3. Intercambio debido a los flujos de la pared.

El fenómeno 1 es el inverso a la penetración del penacho de incendio caliente en la capa superior. En ambos casos el fluido en la punta del penacho puede no ser lo suficientemente flotante como para penetrar la capa respectiva. Una situación relacionada sería un chorro forzado frío introducido verticalmente en la capa inferior.

Dependiendo de las temperaturas relativas, podría no dejar la capa inferior y penetrar en la capa superior. Estos son temas que pueden resolverse con trabajos disponibles en la literatura sobre chorros y penachos flotantes.

El fenómeno 2 no ha sido estudiado suficientemente, pero los datos sugieren que la velocidad de mezcla de flujo puede estar relacionada de forma significativa con la velocidad de flujo de ventilación, especialmente para ventilaciones pequeñas⁽⁴³⁾. Se ha desarrollado una correlación para la velocidad existente a partir de simulaciones con agua salada⁽⁴⁴⁾.

El fenómeno 3 ha sido discutido por Jaluria⁽⁴⁵⁾. Presenta las relaciones que podrían permitir la estimación de la velocidad de transferencia de fluido caliente adyacente a la pared en la capa de gas superior caliente dentro de la capa de gas inferior fría, o viceversa.

Todos estos flujos tienden a hacer menos clara la definición entre las capas de gas superior e inferior, reduciendo su grado de estratificación. Obviamente, esto podría ocurrir naturalmente en el contexto del modelo de zona y uno podría no tener que cambiar a un modelo de compartimento bien mezclado bajo estas condiciones.

Las relaciones para todos estos flujos secundarios no han sido desarrolladas con certidumbre o con aceptación total. Aunque son importantes para la precisión del modelo de zona, se han realizado pocos trabajos de investigación en este sentido.



Figura 3.7 Fenómeno de mezcla de flujos secundaria. (1) Un penacho frío desciende desde la capa superior hacia la capa inferior; (2) mezcla que atraviesa de una corriente de flujo en la abertura que entra; (3) flujos en las paredes debidos a los efectos de flotabilidad local (Fuente: *Enclosure fire dynamics*, Björn Karlsson, James G. Quintiere, p. 266, ⁽²⁾).

3.2.3.4 Efectos de flujos forzados

Los efectos de flujo de aire forzado en las condiciones del incendio y en la propagación del humo debido a fuerzas mecánica o de viento natural, siempre ha sido un tema a analizar en los incendios de grandes edificios. Los efectos del viento y la distribución de presión resultante alrededor de un edificio alto se han convertido en elementos estándar en el diseño estructural, pero no se han estado empleando para diseño de seguridad contra incendios. El movimiento del humo a través de un edificio debido al sistema de ventilación mecánico ha sido simulado por modelos de redes (*network*) que tratan el volumen del compartimento como uniforme en propiedades, y las pérdidas de presión debidas a la fricción en las ventilaciones y los conductos.

Para conectar el sistema de ventilación mecánico en un edificio con un modelo de dos zonas, se deben incluir las características presión-flujo completas del incendio en ambas direcciones, para permitir la posibilidad de flujo por detrás de humo contra la dirección del flujo de aire en los conductos. Un intento de esta unión ha sido desarrollada por Klote y Cooper⁽⁴⁶⁾, quienes lograron una relación característica de recintos ventilados.

3.2.4 Ecuación de conservación de las especies

La fracción en masa de la especie *i* está dada por Y_i . Utilizando la ecuación [31] y aplicando la conservación de la masa para la especie i en un volumen de control, llegamos a la siguiente ecuación:

$$m\frac{dY_i}{dt} + \sum_{\substack{j=1\\net out}}^n \dot{m}_j \cdot \left(Y_{i,j} - Y_i\right) = y_i \dot{m}_f - \dot{m}_{i,loss}$$
[35]

donde *m* es la masa de la capa, \dot{m}_{reac} es la velocidad de masa de combustible gaseoso suministrado, y_i es la fracción de masa de la especie *i* producida por velocidad de masa de combustible suministrado, y $\dot{m}_{i,loss}$ representa las pérdidas debidas a la deposición superficial o la colocación de las partículas.

El término de producción se escribe aquí como $y_i \dot{m}_f$ pero la producción está relacionada en realidad con la velocidad de masa del combustible reaccionado, \dot{m}_{reac} . Sin embargo, para la mayoría de las aplicaciones prácticas, uno debe utilizar datos experimentales para representar el término de producción y, experimentalmente, la producción de la especie *i*, y_i , se mide en términos de \dot{m}_f y no de \dot{m}_{reac} .

El término de producción puede, en principio, ser descrito a través del conocimiento de la ecuación química de la reacción, o de su estequeometría particular. Entonces, los coeficientes estequiométricos pueden utilizarse para representar la producción de las especies y el consumo de oxígeno en términos de velocidad másica del combustible reaccionado.

La estequiometría no es, sin embargo, fácil de determinar, y los gases combustibles, según emergen de la pirólisis de los sólidos, pueden tomar formas químicas diferentes de la composición molecular original del combustible sólido. Por esto la producción en masa de las especies para el incendio se expresa en términos de velocidad de pérdida de masa para el combustible pirolizado.

De ahí, uno debe ser cuidadoso para distinguir entre la masa de combustible suministrado y la que reaccionó, y para relacionar los datos de producción de especies disponibles con las condiciones del incendio particular para la aplicación, esto es, las producciones o velocidades de producción pueden cambiar con las condiciones del incendio, y por consiguiente, en general, no será consistente empleando datos de ensayos a pequeña escala.

3.2.5 Ecuación de conservación de la energía

Dada la ecuación de conservación de la energía como

$$\frac{d}{dt} \iiint_{CV} \rho u dV + \iint_{CS} \rho h v_n dS = \dot{Q}$$
[36]

Sustituyendo h- P/ρ por u en el primer término, asumiendo un estado cuasi estacionario para el volumen de control (dV/dt = 0), y utilizando la ecuación de estado $P = \rho RT$, se puede reescribir como

$$Vc_{p}\frac{dT_{g}}{dt} - V\frac{dP}{dt} + c_{p}\sum_{j=1}^{n}\dot{m}_{j}\left(T_{j} - T_{g}\right) = \dot{m}_{react}\Delta H_{eff} - \dot{q}_{loss}$$
[37]

donde V es el volumen del volumen de control, P es la presión global en el volumen de control, \dot{m}_{react} es la velocidad a la que el combustible reacciona, ΔH_{eff} es el calor efectivo de la combustión, y \dot{q}_{loss} es la tasa de transferencia de calor perdida en las fronteras.

Normalmente en los modelos de zona se asume que todo el combustible suministrado puede reaccionar siempre y cuando haya suficiente oxígeno disponible. Una asunción en la que la suficiencia de oxígeno es considerar que el combustible suministrado reacciona mientras la concentración de oxígeno en ese volumen de control sea mayor o igual a cero, por ejemplo,

$$\dot{m}_{react} = \dot{m}_f \qquad \qquad \text{si } Y_{ox} > 0. \tag{38}$$

A partir de aquí, puede existir una tasa de combustible para ser transportado hacia zonas adyacentes o volúmenes de control donde se debe tomar una decisión sobre si puede continuar reaccionando. En la condición de suficiencia de oxígeno, todo el oxígeno neto suministra o al volumen de control reacciona, así que mientras $Y_{ox} > 0$,

$$\dot{m}_{reac} = r \cdot (\text{velocidad másica neta de oxígeno suministrada})$$
 [39]

donde *r* es el combustible estequiométrico para la velocidad másica de oxígeno.

Esta condición donde $Y_{ox} = 0$ en incendios en recintos cerrados, se denomina *condición de ventilación limitada*. En este punto, tienen lugar cambios significativos en la naturaleza de la reacción química. Notablemente, la combustión incompleta es más predominante para combustibles hidrocarburos, conduciendo a un aumento significativo de la producción de monóxido de carbono y a menudo, hollín. Así, se debe tener cuidado al interpretar los resultados de los modelos de zona una vez se presentan condiciones de ventilación limitada, particularmente con respecto a la predicción de las concentraciones de las especies y a la extensión del quemado. Los datos utilizados para *condiciones bien ventiladas* no se emplean. El tema de mezclas inflamables en una capa de gas en un compartimento y la combustión en una capa viciada no está aún resuelta de forma satisfactoria.

El primer término de la parte izquierda de la ecuación aparece debido al cambio de la energía interna con el volumen de control. Si la temperatura no cambia rápidamente con el tiempo, este término puede ser pequeño, y su eliminación conlleva un aumento a una aproximación cuasi estacionaria para el crecimiento de incendios que permite un análisis más simple.

El segundo término surge del porcentaje de trabajo realizado por la presión según la capa de gas se expanda o contraiga debido al movimiento de la interfase de estratificación térmica. Habiendo sido cambiado, este término ahora expresa el porcentaje de incremento de presión para el compartimento que esencialmente puede estar causado por adiciones de calor o masa netas para los gases del compartimento. Excepto para la acumulación rápida de masa o energía, o para compartimentos con pequeñas aberturas hacia los alrededores, este aumento de presión es pequeño y la presión se mantiene cercana a la presión ambiente.

Esto se mostró en el ejemplo anterior, donde una adición de 100 kW a 72 m³ de volumen de gas en una habitación con un área de ventilación de $0,1 \text{ m}^2$ supuso un aumento de aproximadamente 10 Pa sobre la presión ambiente normal de 101 kPa, lo que ocurre en menos de un segundo. Cualquier incremento de presión dentro del compartimento podría generar un aumento de flujo másico a través de una abertura, y este término en la ecuación [25] puede estar asociado con la expansión volumétrica. A la inversa, una reducción en la velocidad de cesión de la energía supondrá que la presión descienda con respecto al ambiente. Este fenómeno, explica el *efecto de respiración* para los incendios en edificaciones cerradas.

El tercer término de la ecuación [37] tiene en cuenta las tasas de flujo de entalpía y sólo aplica a las *j* corrientes de flujo que entran en el volumen de control, ya que $T_j=T_g$ para todas las corrientes de flujo salientes, mientras que la asunción de temperatura uniforme se sigue aplicando.

3.2.5.1 Transferencia de calor convectivo hacia las superficies

El término \dot{q}_{loss} de la ecuación [37] se compone de pérdidas de calor por convección y radiación hacia las superficies frontera de los volúmenes de control de la capa. Esto incluye tanto a la transferencia de calor de las capas de gas a sus temperaturas como a la transferencia desde la llama. El tratamiento de la transferencia de calor del gas de la capa y la llama se debe realizar para el modelo de zona. Si la llama se convierte en más grande y llena la capa superior, no podemos contar la llama y la transferencia de calor del gas sin ser redundantes.

La transferencia de calor hacia el techo por un penacho de incendio ha sido estudiada ampliamente a escalas modestas, de forma que la radiación de la llama puede haber sido insignificante. Alpert examinó específicamente sólo el calentamiento convectivo⁽⁴⁷⁾, en contraste con los estudios realizados por You y Faeth⁽⁴⁸⁾ y Kokkala⁽⁴⁹⁾, quienes incluían los efectos de la llama.

En general, los efectos convectivos variarán entre el techo, las paredes, y el suelo, y dependiendo de la naturaleza y posición del incendio. En algunos casos se ha introducido apropiadamente una temperatura de pared adiabática, ya que la fuerza que conduce la transferencia de calor convectivo localmente no es la temperatura de la capa de gas global sino la temperatura de la capa límite local, que no se resuelve explícitamente. Los datos de transferencia de calor por convección para las paredes y el suelo de un compartimento o para habitaciones más allá del compartimento de incendio no estan lo suficientemente estudiados. Por consiguiente, la mayoría de los modelos de zona utilizan estimaciones para las correlaciones de convección natural.

3.2.5.2 Transferencia de calor por radiación

La teoría de transferencia de calor por radiación es adecuada para desarrollar los componentes que necesita el modelo de zona. Sin embargo, la teoría no está suficientemente desarrollada como para predecir la radiación de la llama desde sus inicios sin un modelado muy sofisticado del hollín y de la distribución de temperaturas. De ahí, la radiación de la llama se relega a prácticas empíricas. La radiación de una capa de humo es más fácil de resolver dentro del contexto de una capa de gas de propiedades uniformes para el modelo de zona. Una dificultad irresoluble es la disponibilidad de datos de propiedades para determinar la contribución de las partículas de humo a las propiedades de radiación de la capa.

3.2.5.3 Transferencia de calor por conducción

La transferencia de calor por radiación desde el gas debe ser equilibrada mediante la transferencia de calor por conducción por las superficies de contorno. Esto requiere una solución numérica a una ecuación diferencial parcial en conjunción con las ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo que describen la conservación de la energía y la masa para las capas de gas. Normalmente los modelos de zona han considerado sólo conducción en una dimensión, lo que debería ser adecuado para la mayoría de aplicaciones. La mayoría de modelos multicompartimentos no consideran la comunicación mediante conducción hacia el siguiente compartimento, sino que tratan los elementos estructurales como térmicamente gruesos. En principio no habría dificultad con desarrollar un algoritmo preciso para la conducción a través de elementos de contorno para cualquier condición.

3.3 Modelos de campo

La aparición y desarrollo de los modelos de incendios de campo ha estado condicionado por dos circunstancias básicas:

- el perfeccionamiento de los métodos de la fluidodinámica computacional (CFD) y
- el rápido incremento de la potencia computacional.

El empleo de los modelos de CFD ha permitido la descripción de incendios en geometrías complejas y la incorporación de una gran variedad de fenómenos físicos inherentes a los incendios. Existen numerosos articulos resumen de estos modelos, como pueden ser los de Novozhilov o Luo^(50, 51).

Prácticamente toda la investigación de los modelos de incendios de campo se ha fundamentado en el marco conceptual aportado por la forma promediada de Reynolds de las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS) y en particular, en el modelo de turbulencia $k-\varepsilon$ desarrollado por Patankar y Spalding⁽⁵²⁾.

Persiste hasta el momento una polémica en la aplicación de los modelos de CFD a la fenomenología de los incendios que radica en la elección de las técnicas concretas de consideración de la turbulencia.

Por una parte hay partidarios de emplear las RANS con la introducción de coeficientes de transporte de grandes remolinos para describir los flujos de masa, momento y energía no resueltos. Por otra están los partidarios del empleo de la «Simulación de Grandes Remolinos» (LES), una técnica que describe la mezcla turbulenta del combustible en estado gaseoso y los productos de la combustión con la atmósfera local que rodea al fuego. Ambos enfoques presentan sus ventajas y desventajas, y no es el objetivo de este libro esclarecer cuál de ellos es mejor.

Las ecuaciones generales de la dinámica de fluidos describen una gran variedad de fenómenos físicos, muchos de los cuales no tienen nada en común con los incendios. Mantener esta generalidad no tiene sentido, ya que conlleva una enorme complejidad de solución computacional sin aportar significativamente en la descripción de la dinámica del incendio. Por ello las ecuaciones que describen el transporte de masa, momento y energía en fluidos inducidos por incendios deben ser simplificadas para que puedan ser eficientemente solucionadas para los escenarios que ofrecen interés práctico. Las simplificaciones introducidas por Rehm y Baum⁽⁵³⁾ han sido ampliamente admitidas por la comunidad de investigadores de esta materia. Estas ecuaciones simplificadas son conocidas como las ecuaciones de combustión para «pequeños números de Mach» y describen el movimiento de gases a baja velocidad provocado por la cesión de calor química y las fuerzas de flotabilidad (ascendentes).

A continuación, se analiza el proceso matemático de obtención de las *ecuaciones simplificadas* a partir de las ecuaciones generales de la dinámica de fluidos y se describen un conjunto de *métodos numéricos* de resolución *basados en los empleados por el modelo FDS* (Fire Dynamic Simulator) desarrollado por el NIST y que se analizará en el Capítulo 5. Se describe por separado la deducción de cada una de las cinco ecuaciones principales que conforman el modelo, empleando en cada uno de estos apartados la notación específica empleada en FDS.

3.3.1 Ecuación de conservación de la masa

La expresión fundamental es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0$$
[40]

donde:

 ρ – densidad;

$$\nabla \cdot \vec{\varphi} = \frac{\partial \varphi_x}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_y}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_z}{\partial z} - \text{divergencia del campo vectorial};$$

 $\vec{u} = (u, v, w) - \text{vector velocidad.}$

En ella, el primer término representa la variación temporal de la masa en el volumen de control y el segundo, la masa que sale (entra) del (al) volumen de control en todas las direcciones. Evidentemente su suma tiene que ser igual a cero. La interpretación gráfica de esta ecuación se muestra en la Figura 3.8. Desarrollando la divergencia:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + u\frac{\partial\rho}{\partial x} + \rho\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial\rho}{\partial y} + \rho\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial\rho}{\partial z} + \rho\frac{\partial w}{\partial z} = 0$$
[41]

- Evitar que el contorno del mallado se sitúe en el plano de la mayor pared o suelo. (Habrá un gran flujo a través de las aberturas, que pueden llevar a error de inestabilidad numérica).
- Evitar que las llamas o penacho del incendio atraviesen el contorno del mallado. (Véase punto anterior).
- Si se tienen diferentes focos de incendio, ajustar el contorno del mallado a los cambios que se vallan produciendo.
- Si se puede, al crear más de dos mallados, asignarlos a los procesadores de forma que se reparta la carga de los mismos lo mejor posible.

5.2.3.3.2 Refinamiento de rejilla

Por defecto, las celdas de la rejilla que integran el dominio computacional tienen un tamaño uniforme. Sin embargo, es posible especificar que las celdas sean no uniformes en una o dos de las tres direcciones coordenadas. Para una dirección coordenada dada, x, y o z, se puede introducir una función que transforme una rejilla computacional uniformemente espaciada en una rejilla física espaciada de manera no uniformemente. Para ello se deberan seguir los siguientes pasos:

- 1. Prefijar los tamaños de las rejillas en las diferentes zonas: normal (D) y refinada (d).
- 2. Fijar la longitud de la zona en la que se refinará la rejilla (l^*) , mayorando a una «cifra redonda».
- 3. Obtener el nº de divisiones de la zona a refinar (*y*):

$$y = l^*/d$$

4. Obtener el n^o de divisiones totales ($N^o DIV$):

$$N^{o} DIV = x + y + z$$
 con $x + z = (L - l^{*}) / D$

- 5. Mayorar el nº de divisiones totales a una «cifra redonda»: $N^{o} DIV^{*} = N^{o} DIV mayorado a una «cifra redonda»$
- 6. Obtener el parámetro *h*, que corresponde al tamaño de rejilla si no se realizase refinamiento:

$$h = L / (N^o DIV^*)$$

- 7. Calcular x, que es el nº de divisiones antes del comienzo del refinamiento de la rejilla.
- 8. Implementar en FDS el refinamiento de la rejilla

&TRNX CC =, PC = / Pto. 1 (inicio refinamiento) (Coordenada Computacional): $x \cdot h$; (Coordenada Física): $x \cdot D$

- &TRNX CC =, PC = / Pto. 2 (fin del refinamiento)
- (Coordenada Computacional): $(x + y) \cdot h$; (Coordenada Física): $x \cdot D + y \cdot d$

Las ecuaciones anteriores (punto 8) para el cálculo de la coordenada computacional y la coordenada física son validas para el caso XBAR0=0., si



Figura 5.2. Ejemplo de refinamiento de rejilla.

no en la coordenada física se pondría la coordenada donde empiece el refinamiento y la coordenada computacional podrá adoptar valores negativos.

Por ejemplo, para el caso que se muestra en la Figura 5.2, donde se tiene un dominio de 1.500 m de longitud al que se quiere realizar un refinamiento en 107 m, se tendrá que seguir el siguiente procedimiento.

Primeramente se fijan los tamaños de las rejillas en unos tamaños D = 1 m y d = 0.2 m. A continuación se selecciona el tamaño de la zona a refinar (l^*) , que en este caso se mayora a 150 m en vez de los 107 m establecidos inicialmente.

Se hallan posteriormente el número de divisiones de la zona a refinar, y = 150 / 0.2 = 750 div y de la zona restante, x + z = (1.500 - 150) / 1 = 1.350.

El número de divisiones totales serán la suma de todas las divisiones, 750 + 1.350 = 2.100 div, que se redondeará a 2.000 div para tener un número redondo. Además el parámetro h = 1.500/2.000 tendrá un valor de 0,75.

El inicio del refinamiento se produce a los (500 - (125/2)) = 425 m, con lo que el número de divisiones serán x = 425 div.

La implementación de este refinamiento en FDS se realizará introduciendo al inicio del fichero de entrada las siguientes líneas:

&TRNY CC = 318,75 (425.0,75), PC = 425 &TRNY CC = 881,25 ((425+750).0,75), PC = 575 (425+150)

Para finalizar, comentar que este método de refinamiento de rejilla es, actualmente, más recomendable que el empleo de una maya más fina dentro de otra más gruesa, pero, como se ha podido comprobar, su implementación también es más laboriosa.

5.2.3.4 Definición de los parámetros globales

Dentro de este apartado se van a introducir los principales parámetros que aparecen en el grupo misceláneo MISC. Dentro de este grupo se pue-

den variar parámetros para cambiar el modo en que se analiza la turbulencia por el modelo (LES o DNS), introducir valores por defecto o iniciales para ciertos parámetros, variar el número de datos de salida por cálculo, variar algún parámetro de las partículas lagrangianas, etc.

Principalmente se emplean los siguientes parámetros: DATABASE, seguido del nombre del fichero que contiene información sobre los materiales y parámetros de reacción para combustibles. En vez de emplear el parámetro anterior, se puede introducir la dirección del directorio donde se encuentra la base de datos con esta información y con las características de los sprinklers con el parámetro DATABASE_DIRECTORY.

Otros dos parámetros muy empleados dentro de este grupo son SURF_DEFAULT y REACTION. El primero indica la SURF IDs considerada por defecto, por lo que en el caso de que no se indique otra cosa todas las superficies tendrán este valor. REACTION indica el parámetro de reacción (REAC) a utilizar.

5.2.3.5 Conexiones con el exterior

Para prescribir conexiones con el exterior, en FDS se emplea el Grupo VENT. Este grupo solamente se puede utilizar en las paredes exteriores del dominio o en planos adyacentes a obstrucciones en el interior del dominio. Si se define en el interior del dominio sin una superficie sólida sobre la que estar, actúa únicamente como ventilador.

La definición de una abertura se realiza introduciendo las coordenadas x0, x, y0, y, z0 y z de la misma, donde, al ser un plano, dos de las coordenadas de una misma dirección deberán de ser iguales. Por ejemplo podrá ser el siguiente:

&VENT XB=0.0,5.0,1.5,9.5,0.0,0.0/

donde las coordenadas en z son iguales, por lo que se está definiendo un plano perpendicular a dicho eje.

Para especificar una abertura completa en la pared externa, se reemplazaría XB por CB seguido del valor 'XBAR', 'XBAR0', 'YBAR', 'YBAR0', 'ZBAR' o 'ZBAR0' que indica el plano del dominio computacional que se encuentra abierto. Cuando se emplea esta forma de definición y se están empleando simulaciones multibloque, se debe de tener cuidado ya que el plano designado por CB se aplicará a todas las mallas, lo que puede crear una cierta confusión.

Cuando se aplica el parámetro VENT dentro del dominio computacional, se puede emplear para conseguir dos objetivos, por un lado, modelar el funcionamiento de un sistema de ventilación en un edificio, o para aplicar una condición de contorno particular a un plano sobre una superficie sólida, como por ejemplo, definir la fuente de ignición. En estos dos casos, la condición de contorno se especificará con el Grupo SURF, que se verá en apartados posteriores.

Además, dentro del Grupo SURF, si se define SURF_ID = 'OPEN', parámetro reservado para el Grupo VENT, se estará indicando que el contorno exterior del dominio computacional tiene una abertura pasiva al exterior. Comentar que las aberturas hacia el exterior del dominio computacional se pueden abrir y cerrar durante la simulación.

5.2.3.6 Particiones internas al dominio computacional

La definición de todos los elementos que se encuentran en el interior del dominio computacional se definen mediante el Grupo OBST. Para definir un sólido, se introducirán en OBST las coordenadas del mismo dentro del dominio computacional por medio de dos puntos, tal y como se muestra a continuación:

&OBST XB = X1, X2, Y1, Y2, Z1, Z2/

La definición anterior es la forma más simple de definir un elemento sólido, normalmente se tendrán que especificar también las condiciones de contorno, definidas por el Grupo SURF, a aplicar a la superficie de la obstrucción:

- SURF_ID, especifica las condiciones de contorno de todas las caras.
- SURF_IDS, especifica las condiciones de contorno para la parte superior, las caras laterales y el fondo de la obstrucción.
- SURF_ID6, asigna las condiciones de contorno a cada una de las caras del sólido, en los planos x0, x, y0, y, z0 ,z.

Por ejemplo, para este último caso se tendría: &OBST XB=0.5,2.5,1.7,3.2,0.0,3.5, SURF_ID6='BURNER','INERT','HOT','COLD','BLOW','INERT'/

Con lo que se están definiendo las propiedades de todas las caras.

Se recomienda que las obstrucciones tengan un espesor de al menos una rejilla, ya que aunque FDS permite tener obstrucciones de espesor cero o con espesor menor de una rejilla (FDS la aproximará a la rejilla más próxima); esta característica todavía no está muy bien lograda, y en algunos casos las obstrucciones demasiado pequeñas respecto del tamaño de rejilla son eliminadas. Para la creación de los elementos que conforman la geometría del modelo que se está generando, se emplea, junto con el Grupo OBST, el Grupo HOLE. Este grupo permite crear un hueco en una obstrucción existente, o eliminar obstrucciones. Su formato es similar al de las obstrucciones:

&HOLE XB=2.0,4.5,1.9,4.8,0.0,9.2/

Las obstrucciones que se intersecten con este volumen son partidas, eliminándose el volumen de contacto entre ambas. Para crear una puerta o una ventana, se recomienda perforar algo más de lo suficiente para crear el hueco.

A lo largo del desarrollo de la simulación, puede ser conveniente crear o eliminar obstáculos sólidos, VENTs interiores o cerrar las aberturas exteriores durante un determinado periodo de tiempo. Para ello se emplean los parámetros T_REMOVE y T_CREATE en la línea OBST, VENT o HOLE. Por ejemplo, para crear una obstrucción y después eliminarla se pondría:

&OBST XB=...,SURF_ID='PUERTA',T_CREATE=30.,T_REMOVE=39. /

Además de esta creación/eliminación en función del tiempo, se puede temporizar mediante un detector de calor (HEAT), colocando la cadena de caracteres HEAT_REMOVE o HEAT_CREATE seguida del nombre del detector de calor. Si a continuación de HEAT_REMOVE o HEAT_CREATE se pone 'ALL', la acción se llevará a cabo por la activación de cualquiera de los detectores de calor.

Otro parámetro interesante a la hora de distinguir los diferentes elementos que se van introduciendo en el modelo es el que permite colorear las OBST y las VENT. Para ello se definirán tres números reales denominados RGB en la línea SURF (por defecto), OBST o VENT. Los tres números deben estar entre 0 y 1, indicando la cantidad de rojo, verde y azul que conforman el color.

&SURF ID='TAPIZADO',..., RGB=0.0,1.0,0.0 /

Además de esta forma de definición, se pueden emplear colores predefinidos de la forma COLOR= 'RED', 'BLUE', 'YELLOW', 'GREEN, 'MAGENTA', 'WHITE', 'CYAN' o 'INVISIBLE'.

Para finalizar con la creación de obstrucciones, comentar que debido a que FDS utiliza una rejilla cartesiana, y a que todos los elementos tienen que adaptarse a dicha rejilla, hay ciertas geométricas que no son posibles de modelar con un ajuste perfecto a la rejilla rectangular. Por ello FDS permite emplear el parámetro 'SAWTOOTH=.FALSE' en las obstrucciones donde la geometría es curva pero se está representando utilizando las obstrucciones rectangulares. El efecto de este parámetro es, además, prevenir la vorticidad debida a los bordes angulosos, allanando los contornos dentados de la obstrucción.

5.2.3.7 Definición de los parámetros de combustión

Una vez llegados a este punto y antes de introducir las propiedades de las superficies, se introducirá en el empleo del Grupo REAC. Dentro de este grupo se designan los parámetros asociados con la reacción en fase gas del combustible y el oxígeno.

Se pueden seleccionar estos parámetros de reacción de los disponibles en el DATABASE de FDS vía el parámetro REACTION de la línea MISC, o crear en base a los siguientes factores:

- ID nombre que se da a la reacción.
- NU_O2, NU_H2O, NU_FUEL, NU_CO2 Coefiencientes estequiométricos ideales para la reacción de un combustible hidrocarburo.
- MW_FUEL Peso Molecular del combustible (g/mol). Si el combustible tiene nitrógeno, añadir el parámetro FUEL_N2 para indicar cuántas moléculas de nitrógeno hay presentes.
- Y_O2_INFTY Fracción de masa de oxígeno en el ambiente.
- Y_F_INLET Fracción de masa de combustible en el flujo de combustible.
- SOOT_YIELD Es la fracción de masa combustible convertida en partículas de humo.
- CO_YIELD Fracción de masa de combustible convertida en monóxido de carbono.
- EPUMO2 Energía por Unidad de Masa de Oxígeno, (kJ/kg).
- RADIATIVE_FRACTION La fracción de energía cedida desde la llama como radiación térmica.

Todos estos parámetros tienen un valor por defecto, por lo que no es necesario introducirlos todos a la hora de definir un reactante. Un ejemplo de definición de un reactante podría ser:

&REAC ID='POLYSTYRENE' MW_FUEL=104. NU_O2=10. NU_H2O=4. NU_CO2=8. SOOT_YIELD=0.164 CO_YIELD=0.06 RADIATIVE FRACTION=0.45 /

5.2.3.8 Definición de las propiedades de los materiales

Para definir las condiciones de contorno para todas las superficies sólidas y para las aberturas de dentro y alrededor del dominio computacional, se emplea el grupo SURF. La estructura de este parámetro consta de una cadena de identificación ID ='...' para poder referirse a ella mediante una OBST o VENT.

Entre los usos de este grupo se encuentra la definición de los parámetros que sirven para definir un incendio. Si se emplea el modelo de fracción de mezcla, estos parámetros pueden ser:

- HRRPUA Velocidad de Cesión de Calor por Unidad de Área (kW/m²).
- HEAT_OF_VAPORIZATION (KJ/kg) Cantidad de energía que se requiere para vaporizar un combustible (líquido o sólido) una vez ha alcanzado su temperatura de ignición.
- TMPING Temperatura (°C) a la que el material empieza a arder.
- BURN_AWAY Si un objeto ardiendo va a desparecer de los cálculos una vez que el combustible se ha agotado se prescribirá 'BURN_AWAY=.TRUE' en la linea SURF.

FDS distingue cuatro tipos de *condiciones de contorno térmicas* para los materiales que se introducen en la simulación. Se puede tener una 'Superficie sólida a temperatura fija', para lo cual se establece TMPWAL como la temperatura de la superficie (°C). Si se tiene una 'Superficie sólida con flujo de calor fijo', se establece un HEAT_FLUX como flujo de calor convectivo (kW/m²), sabiendo que si HEAT_FLUX>0 la pared calentará a los gases circundantes; y si HEAT_FLUX<0 entonces la pared enfriará a los gases que se encuentran a su alrededor. La tercera condición de contorno es la de 'Sólido térmicamente grueso'. En este caso se deberán especificar para definir al material la conductividad térmica KS (W/m·K), la densidad DENSITY (Kg/m³), el calor específico C_P (kJ/kg/°K), y el espesor del material DELTA (m). Por último, para indicar que se dispone de una 'Lámina térmicamente delgada', se introducirá C_DELTA_RHO, que es el producto del calor específico (kJ/kg K), de la densidad (kg/m³) y del espesor del recubrimiento (m).

Antes de pasar a las condiciones de contorno de velocidad, comentar que FDS sólo tiene en cuenta las características de la capa más externa, considerando que detrás de esa capa pueden suceder una de estas tres cosas: por defecto considera que existe un hueco de aire a temperatura ambiental. Puede considerar que esta capa es contigua a un material aislante de modo que no hay una pérdida de calor hacia el material aislante (BACKING = 'INSULATED') o puede considerar que al otro lado de la pared hay una habitación contigua (BACKING = 'EXPOSED'). Este último caso sólo funcionará si la pared tiene un ancho igual a una celda de rejilla, y si hay un volumen no nulo dentro del dominio computacional correspondiente a la otra parte del muro.

Al igual que existe la posibilidad de definir condiciones de contorno térmicas en una superficie, también se pueden definir *condiciones de contorno de velocidad*. La definición de esta condición de contorno permite crear ventiladores, extractores de aire, etc., lo que en muchos casos puede resultar muy útil. Se permiten prescribir, por un lado las componentes normales, y por otro las tangenciales del vector velocidad en las superficies asociadas.

La componente normal de la velocidad se controla mediante el parámetro VEL, entrando en el dominio computacional si VEL < 0 y saliendo si VEL > 0. Si en vez de definir la velocidad se desea especificar un flujo de volumen dado que pase a través de una abertura se introducirá VOLU-ME_FLUX en vez de VEL. En este caso, si el flujo está entrando al dominio computacional VOLUME_FLUX será menor que cero y viceversa. Estos dos parámetros son incompartibles entre si por lo que sí se define uno, el otro no podrá introducirse.

La componente tangencial controla cómo se 'pega' el gas a una superficie sólida. Se prescribe mediante un par de números reales VEL_T que representan las componentes de velocidad tangencial deseadas (en dirección x o y y en dirección y o z, dependiendo de la dirección normal).

FDS permite la introducción de valores variables con el tiempo para ciertos parámetros, como por ejemplo la temperatura, el flujo de velocidad, las velocidades de combustión, etc. A esto se le denota como condiciones de contorno dependientes del tiempo. Al principio de los cálculos estos parámetros aumentan desde sus valores iniciales a los valores definidos a lo largo del tiempo.

Los parámetros TAU_Q y TAU_V indican el tiempo que tardan las cantidades térmicas o hidrodinámicas en aumentar hasta sus valores prescritos en TAU segundos, y permanecer ahí. TAU_Q es el tiempo de aumento característico de la velocidad de cesión de calor por unidad de área o de la temperatura de la pared. Si TAU_Q es mayor que cero la velocidad de cesión de calor aumentará como $(tanh(t/\tau))$ y si es menor que cero la velocidad de cesión de calor aumenta de la forma $(t/\tau)^2$. TAU_V es el tiempo de aumento característico de la velocidad normal en una superficie o del flujo de volumen. Por ejemplo, si la curva de incendio aumenta siguiendo una curva cuadrática durante 50 s hasta 1.000 kW/m² y posteriormente se mantiene constante, se pondría: Si se desea una función de ascenso distinta a las descritas anteriormente, se puede introducir una secuencia. Para ello, se establecerá RAMP_Q o RAMP_V igual a una cadena de caracteres que nombren la función rampa a emplear para el tipo particular de superficie. Un ejemplo de esta descripción puede ser:

```
&SURF ID = 'BURNER', HRRPUA = 293, RAMP_Q = 'Q1'/
&RAMP ID='Q1', T= 0, F=0.00 /
&RAMP ID='Q1', T= 100, F=0.0691 /
&RAMP ID='Q1', T= 150, F=0.1157 /
&RAMP ID='Q1', T= 200, F=0.277 /
&RAMP ID='Q1', T= 300, F=0.623 /
&RAMP ID='Q1', T= 380, F=1 /
&RAMP ID='Q1', T= 650, F=1 /
&RAMP ID='Q1', T= 1800, F=0.00 /
```

donde T es el tiempo, y F indica la fracción de velocidad de cesión de calor, temperatura de la pared, velocidad, fracción de masa, etc.

Para finalizar con la definición de las condiciones de contorno, se definirán las *condiciones de contorno dependiente de la temperatura*. Estas condiciones de contorno permiten definir valores diferentes de parámetros térmicos tales como el calor específico de un sólido (C_P) o la conductividad térmica de un sólido (KS) según la temperatura que se dispone. Por ejemplo:

&SURF ID='MARINITE', EMISSIVITY=0.8, DENSITY=737., RAMP_C_P='rampcp', RAMP_KS='rampks', DELTA=0.0254 /
&RAMP ID='rampks', T=24., F=0.13 /
&RAMP ID='rampks', T=149., F=0.12 /
&RAMP ID='rampcs', T=538., F=0.12 /
&RAMP ID='rampcp', T=93., F=1.172 /
&RAMP ID='rampcp', T=205., F=1.255 /
&RAMP ID='rampcp', T=316., F=1.339 /
&RAMP ID='rampcp', T=425., F=1.423 /

siendo T la temperatura y F es el valor actual de cada C_P ó KS.

5.2.3.9 Partículas lagrangianas, sprinklers y detectores

5.2.3.9.1 Partículas lagrangianas

Las partículas lagrangianas son utilizadas en FDS como gotas de agua, gotas de combustible líquido, trazadoras de flujo, etc. Algunas veces las

partículas tienen masa y otras no, algunas veces se evaporan, absorben radiación, etc.

El grupo PART se utiliza para prescribir los parámetros de las partículas lagrangianas, conteniendo información sobre las distintas partículas y gotas, disponiéndose de una línea PART para cada uno de los diferentes tipos de partículas lagrangianas.

Habitualmente las partículas lagrangianas se pueden introducir en un sólido a través de la línea SURF del material, &SURF ..., PART_ID='smoke' / o pueden ser invocadas desde la línea de un sprinkler para variar las propiedades de las gotas, &SPRK PART_ID='water' ... /.

El uso más simple de las partículas lagrangianas es para su visualización, en cuyo caso las partículas son consideradas partículas sin masa, &PART ID='tracr',MASSLESS=.TRUE., .../

Con este grupo se puede cambiar desde la frecuencia de aparición en la simulación de las partículas hasta un gran número de parámetros que se pueden consultar en la guía de usuario del modelo.

5.2.3.9.2 Sprinklers

Las características de los sprinklers se definen en un archivo, sprinkler_name.spk. En el fichero de 'entrada' se llamará al fichero anterior mediante la línea:

&SPRK XYZ=3.0, 5.6, 2.3, MAKE='sprinkler_name',LABEL='doorway' /

donde XYZ son las coordenadas del sprinkler, MAKE es el nombre del sprinkler en los ficheros de entrada, y LABEL identifica el nombre del sprinkler en los archivos de salida.

Existe la posibilidad de activar y desactivar los sprinklers manualmente, T_ACTIVATE y T_DEACTIVATE, redireccionar el sprinkler en dirección diferente que hacia abajo, ORIENTATION, etc., siendo necesario para ajustar los parámetros que controlan el número y la frecuencia de gotas evacuadas por los sprinklers ir al grupo PART.

Las principales propiedades listadas en el archivo sprinkler_name.spk son:

- RTI Índice de tiempo de respuesta del sprinkler, en $\sqrt{(m/s)}$.
- C-FACTOR Factor C del sprinkler, en $\sqrt{(m/s)}$.
- K-FACTOR Factor K del sprinkler, en L/min/bar^{1/2}.
- ACTIVATION_TEMPERATURE Temperatura de activación (°C).
- OPERATING_PRESSURE Presión de operación del sprinkler, en bares.
- OFFSET_DISTANCE Radio de una esfera (m) que rodea el sprinkler donde las gotas del agua se colocan inicialmente en la simulación.

- VELOCITY Descripción de la distribución de velocidad inicial de las gotas. Hay dos opciones:
 - Caso 1: definir ángulo de spray mínimo, ángulo de spray máximo, y speed. Los ángulos perfilan una configuración de spray cónico relativa al polo sur de una esfera centrada en el sprinkler de radio OFFSET_DISTANCE.
 - Caso 2: Si se conoce más información detallada sobre el spray del sprinkler, indicar la componente normal de la velocidad de las gotas como una función de *na* puntos azimutales (latitudinales), comenzando en el fondo de la esfera y *nl* puntos longitudinales, comenzando en uno de los brazos del esquema. Los números enteros *na* y *nl* deben incluirse en la línea a continuación del «2»
- FLUX Flujo de masa de agua relativo (kg/m²/s), introducido de la misma manera que el caso 2 de VELOCITY. En caso 1 de VELO-CITY, no se necesita este valor.
- SIZE_DISTRIBUTION Información sobre la distribución de tamaños de gota. El diámetro medio de gota puede ser un valor global, o se puede establecer como función del ángulo sólido.

5.2.3.9.3 Detectores

Dentro de los detectores FDS distingue entre detectores de calor y detectores de humo.

Un detector de calor se designa en el archivo de entrada con una o más líneas de la forma:

&HEAT XYZ=3.0,5.6,2.3, RTI=132., ACTIVATION_TEMPERATU-RE=74.,LABEL='door' /

donde XYZ son las coordenadas físicas del detector de calor, RTI es el *índice de tiempo de respuesta* en $\sqrt{m \cdot s}$, ACTIVATION_TEMPERATU-RE es la temperatura de activación en °C. Por defecto, 74 °C y LABEL es un identificador del detector.

Los detectores de humo se designan con una línea de la forma:

&SMOD XYZ=3.0,5.6,2.3, LENGTH=1.8, ACTIVATION_OBSCURA-TION=1.0, LABEL=' Heskestad Model'/

para el modelo de un solo parámetro Heskestad. O como:

&SMOD XYZ=3.0,5.6,2.3, ALPHA_C=1.8, BETA_C=1.1, ALPHA_E=0.98, BETA_E=-0.77, ACTIVATION_OBSCURATION=1.0, LABEL='Cleary Model'

en el modelo de cuatro parámetros Cleary Model.