



**Universidad**  
Zaragoza

# Proyecto Fin de Carrera

## Análisis Computacional de la Dispersión de Contaminantes en Medios Urbanos

Autor:

Alejandro Sierra Luño

Director:

Antonio Pascau Benito

Escuela de Ingeniería y Arquitectura

2014



# ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES EN MEDIOS URBANOS

## RESUMEN

El objetivo principal del presente proyecto es el análisis por medio de simulaciones por ordenador del comportamiento de un contaminante, emitido desde una fuente situada en un entorno urbano.

Se tienen en cuenta diversos parámetros como la densidad y la difusividad del contaminante, la velocidad y dirección del viento y la posición de la fuente. Así mismo, se contemplan diversas geometrías urbanas típicas con las que interactúa el flujo.

En el proceso, el primer paso consiste en generar el modelo 3D del entorno urbano donde interesa ver el movimiento del contaminante, para seguidamente realizar una discretización del dominio que va a ocupar el aire y dicho contaminante. Esto da lugar a la malla en cuyos nodos se realizarán posteriormente los diversos cálculos. Estas operaciones se realizan en el software *Salome*.

El segundo paso es la creación de un modelo adecuado para los fines que buscamos. En este caso utilizamos el programa de cálculo CFD *OpenFOAM*, para el cual se desarrolla un modelo matemático del proceso que nos interesa, que incluye el comportamiento del viento y el de un contaminante dentro de él.

Una vez obtenidos la malla del dominio y el algoritmo del modelo que rige el comportamiento del sistema viento+contaminante, se procede a la definición de las condiciones de contorno y a la introducción de otros datos numéricos necesarios, todo lo cual constituye el *caso* a resolver.

Cumplidos todos los requisitos, se está en disposición de iniciar el proceso de cálculo, al final del cual obtenemos los resultados del movimiento del contaminante dentro del flujo de aire, además de otras variables físicas que intervienen en el problema.

Por último, dichos resultados se visualizan mediante el programa de postprocesado *ParaView*, que permite realizar representaciones y gráficos de diversas formas, lo que ayuda a analizar la validez de los resultados.





# AGRADECIMIENTOS

Me gustaría agradecer a todas las personas que me han animado, aconsejado, sugerido y ayudado durante la realización de este proyecto.

Debo agradecer al Dr. Antonio Pascau Benito, profesor y director del presente proyecto, su tiempo y su ayuda para resolver los problemas que han ido surgiendo, siempre solucionados gracias a su experiencia.

Mención especial merece el Dr. Radu Mustata, quien me ha facilitado enormemente el aprendizaje y la comprensión del software utilizado, que era para mí totalmente desconocido.

Finalmente, agradezco especialmente el apoyo y paciencia de mi familia durante este tiempo, especialmente a mis padres.

Muchas gracias a todos.



# INDICE

1	Introducción .....	13
1.1	Motivación .....	13
1.2	Objetivos .....	14
1.3	Estructura de la memoria.....	14
2	Enfoque del problema.....	16
2.1	Modelo CFD.....	16
3	Simulaciones realizadas .....	18
3.1	Aspectos geométricos .....	18
3.2	Validación del modelo.....	18
3.3	Interacción con edificios .....	20
3.4	Influencia de la difusividad del contaminante .....	21
3.5	Influencia de la densidad del contaminante .....	22
3.6	Ejemplo de caso real: Edificio Torres Quevedo.....	24
4	Procedimiento de análisis numérico .....	25
4.1	Introducción .....	25
4.2	Obtención del modelo CAD y mallado .....	25
4.3	Cálculo computacional .....	27
4.3.1	Consideraciones iniciales .....	27
4.3.2	Creación del solver .....	28
4.3.2.1	Modificaciones .....	28
4.3.3	Creación del caso. Estructura de archivos.....	29
4.3.3.1	Importación de la malla.....	31
4.3.3.2	Condiciones iniciales y de contorno.....	31
4.3.3.3	Propiedades físicas.....	32
4.3.3.4	Métodos de discretización .....	32
4.3.3.5	Tolerancia y criterios de convergencia.....	32
4.3.3.6	Variables de control de la simulación .....	32
4.3.4	Proceso de cálculo.....	32
4.3.5	Resultados .....	33
4.4	Visualización de resultados .....	33
5	Resultados finales y comparación.....	34

5.1	Validación del modelo.....	34
5.2	Interacción con edificio aislado.....	39
5.3	Estudio del efecto de la difusividad .....	41
5.4	Estudio del efecto de la densidad .....	42
5.5	Ejemplo de caso real: Edificio Torres Quevedo.....	46
6	Conclusiones.....	54
7	Bibliografía .....	55
ANEXO I: Conceptos Previos .....		57
1	Qué es un fluido. Realidad e idealización.....	57
2	Ecuaciones fundamentales de los fluidos .....	58
2.1	Conservación de la cantidad de movimiento.....	61
2.2	Conservación de la masa.....	61
2.3	Forma general de las ecuaciones de movimiento (Caracterización de la ecuación de Navier-Stokes) .....	62
2.4	Aplicación a fluidos newtonianos.....	65
2.5	Fluidos newtonianos incompresibles .....	70
3	Ecuaciones adicionales.....	71
4	Ecuación del modelo de un contaminante.....	72
4.1	Conservación de cantidades escalares.....	72
4.2	Densidad variable debida a la presencia del contaminante .....	74
5	Turbulencia.....	75
5.1	Flujos turbulentos .....	75
5.2	Modelos de turbulencia .....	75
5.3	Método RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) .....	77
ANEXO II: Enfoque del problema de dispersión.....		79
1	Características de la atmósfera urbana.....	80
2	Consideraciones de escala .....	80
3	Marco del modelado de dispersión .....	85
3.1	Teoría de la dispersión turbulenta .....	85
3.2	Modelos de orden reducido.....	85
3.3	Modelos CFD .....	86
3.4	Componentes de un modelo CFD .....	86
3.5	Hipótesis en el modelado CFD .....	90
3.6	Ecuaciones del modelo.....	90

3.7	Ecuaciones para la turbulencia .....	91
3.8	Condiciones de contorno .....	91
ANEXO III: Modelado 3D y Mallado .....		92
1	Obtención del modelo CAD.....	92
1.1	Elección del software .....	92
1.2	Consideraciones previas.....	92
1.3	Modelado del edificio o conjunto de edificios.....	93
1.4	Modelado de la zona inmediata a los edificios (zona interior) .....	94
1.5	Modelado de la zona exterior .....	95
1.6	Preparación previa al mallado.....	96
2	Proceso de mallado .....	97
2.1	Comentarios previos .....	97
2.2	Mallado de la zona interior .....	98
2.3	Mallado de la zona exterior .....	101
2.4	Unión y resultado final .....	102
ANEXO IV: Código del <i>solver</i> y ficheros .....		105
1	El <i>solver</i> .....	105
1.1	Fichero <i>myRhoScalarPimpleFoam.C</i> .....	105
1.2	Fichero <i>createFields.H</i> .....	106
1.3	Fichero <i>UEqn.H</i> .....	109
1.4	Fichero <i>pEqn.H</i> .....	109
1.5	Fichero <i>SEqn.H</i> .....	111
2	Archivos de caso.....	111
2.1	Directorio <i>system</i> .....	112
2.1.1	Fichero <i>controlDict</i> .....	112
2.1.2	Fichero <i>fvSchemes</i> .....	113
2.1.3	Fichero <i>fvSolution</i> .....	115
2.2	Directorio <i>constant</i> .....	116
2.2.1	Fichero <i>transportProperties</i> .....	116
2.2.2	Fichero <i>thermophysicalProperties</i> .....	117
2.2.3	Fichero <i>turbulenceProperties</i> .....	117
2.2.4	Fichero <i>RASProperties</i> .....	118
2.2.5	Directorio <i>polyMesh</i> .....	118
2.3	Directorios temporales.....	120

2.3.1	Variable $U$ .....	120
2.3.2	Variable $\rho$ .....	121
2.3.3	Variable $S$ .....	122
2.3.4	Variable $p$ .....	124
2.3.5	Variable $T$ .....	125
2.3.6	Variable $R$ .....	126
2.3.7	Variable $k$ .....	127
2.3.8	Variable $\epsilon$ .....	128
2.3.9	Variable $\omega$ .....	130
2.3.10	Variable $\alpha$ .....	131
2.3.11	Variable $\mu$ .....	133
2.3.12	Variable $\nu$ .....	134
2.3.13	Variable $\nu_{Tilda}$ .....	136
2.3.14	Directorio <i>include</i> , fichero <i>ABLConditions</i> .....	137
ANEXO V: Resultados .....		138
1	Análisis de la influencia de la densidad .....	139
2	Caso real: Edificio Torres Quevedo .....	145
2.1	Viento del NO .....	145
2.1.1	Viento a 20 km/h .....	145
2.1.2	Viento a 25 km/h .....	150
2.1.3	Viento a 30 km/h .....	155
2.1.4	Viento a 35 km/h .....	160
2.1.5	Viento a 40 km/h .....	165
2.2	Viento del N-NO .....	170
2.2.1	Viento a 20 km/h .....	170
2.2.2	Viento a 25 km/h .....	175
2.2.3	Viento a 30 km/h .....	180
2.2.4	Viento a 35 km/h .....	185
2.2.5	Viento a 40 km/h .....	190
2.3	Viento del O-NO .....	194
2.3.1	Viento a 20 km/h .....	194
2.3.2	Viento a 25 km/h .....	198
2.3.3	Viento a 30 km/h .....	202
2.3.4	Viento a 35 km/h .....	206

2.3.5	Viento a 40 km/h.....	210
2.4	Viento del SE .....	214
2.4.1	Viento a 5 km/h.....	214
2.4.2	Viento a 10 km/h.....	219





# MEMORIA



# Capítulo 1

## 1 Introducción

### 1.1 Motivación

Una gran parte de la población mundial vive y trabaja actualmente en áreas urbanas, lo cual no hará más que aumentar de aquí al futuro. Esta tendencia ha inspirado recientemente muchos estudios sobre mecánica de fluidos centrados en el análisis urbano, tanto de forma aislada como en combinación con otras disciplinas como la química, la epidemiología o la movilidad de peatones y vehículos.

A medida que muchas ciudades alrededor del mundo se vuelven más y más pobladas, aumenta la preocupación por la generación de contaminación en el aire y, especialmente, su impacto en la salud de los habitantes locales. En la mayor parte del mundo desarrollado, la legislación ya obliga a las autoridades locales a realizar controles sobre la concentración de contaminantes concretos producidos por la industria y el transporte para poder iniciar acciones que mitiguen sus efectos y emitir avisos para prevenir a la población más sensible a la calidad del aire.

En este sentido, la contaminación del aire en los alrededores de los edificios es un importante problema medioambiental. Sin embargo, la predicción de la dispersión de contaminantes resulta difícil debido a la compleja interacción que existe entre el flujo de aire atmosférico y el que circula alrededor de los edificios.

Históricamente, el control de las emisiones contaminantes se ha realizado a través de la monitorización de las fuentes emisoras. Sin embargo, existe una tendencia creciente en el uso del modelado como complemento de esta monitorización, pudiendo llegar a sustituirlas por completo en áreas donde la contaminación es menos acusada y su control menos crítico.

Los modelos de dispersión actuales fueron desarrollados para grandes escalas y bajas resoluciones, y no son capaces de reproducir la distribución espacio-temporal de la contaminación del aire dentro de entornos urbanos donde se encuentra la mayoría de la población. Por lo tanto, es necesaria todavía una gran cantidad de trabajo de investigación en el desarrollo de modelos y la elaboración de estudios que cubran el comportamiento de flujos de aire urbano a una menor escala, lo cual se desarrolla en el presente proyecto.

Además, la complejidad a la hora de realizar estudios empíricos a escala real sobre este tema hace que el uso de modelos teóricos cobre gran interés. Otras ventajas son la posibilidad de modificar los modelos para recrear condiciones ambientales diversas y distintos escenarios reales o hipotéticos. Esto permite evaluar la idoneidad de diferentes distribuciones y diseños de edificios de manera que, en su constante crecimiento, las ciudades se moldeen de manera aerodinámicamente responsable/inteligente, aprovechando la fuerza del viento en emplazamientos donde ésta sea destacable, y a la vez protegiendo a la población de sus efectos potencialmente dañinos, ya sea por su fuerza destructiva o por el transporte de sustancias contaminantes en su interior, lo cual constituye el tema principal de este proyecto.

A este respecto, y como motivación adicional, Zaragoza es una ciudad reconocida por su viento característico, convirtiéndose en un objeto idóneo para este tipo de estudios.

Como estímulo final, la posibilidad de que este proyecto pueda servir como base para trabajos posteriores.

## **1.2 Objetivos**

El fin fundamental de este proyecto consiste en desarrollar un modelo de análisis de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) que sirva como herramienta de estudio del comportamiento de un gas contaminante inerte en la atmósfera a nivel urbano en distintas situaciones, para aplicarlo a casos reales y realizar predicciones sobre posibles emisiones peligrosas.

Para ello, el primer objetivo es el de obtener un modelo matemático que reproduzca el movimiento del aire y de un contaminante en su interior. Esto se traduce en desarrollar un algoritmo en C++ para el software de CFD *OpenFOAM*, que será el que se utilice en este proyecto, y que pueda ser utilizado por otros usuarios en estudios de este tipo o como base para la creación de otros códigos.

A continuación, como segundo objetivo se plantea el análisis del comportamiento de un contaminante según varios parámetros en distintos escenarios, para lo que se realizan diversas simulaciones numéricas utilizando el modelo matemático creado anteriormente.

Por último, se trata de mostrar la utilidad del modelo mediante el estudio de una situación hipotética en un escenario real, que sirva para plantear distintas medidas en caso de producirse una emisión peligrosa.

La decisión de analizar distintas situaciones hace necesaria la inclusión de variables como la densidad del contaminante, la velocidad y dirección del viento, la geometría de la zona urbana, la posición de la fuente o la duración de la emisión, entre otras, para cubrir la mayor cantidad de casos posible y determinar qué parámetros son lo más determinantes.

En cuanto a la observación del comportamiento del contaminante considerado en cada caso, dado que se considerará una sustancia no reactiva, los análisis se basarán principalmente en el estudio de su concentración en distintos puntos de cada escenario planteado, así como de la visualización del movimiento global del gas.

Finalmente, para llevar a cabo la validación del modelo de cálculo CFD desarrollado, se realizará una comparación de los datos obtenidos en un experimento real de túnel de viento (1) con los resultados de una simulación numérica del mismo experimento.

## **1.3 Estructura de la memoria**

En esta memoria se trata de mostrar de forma condensada todo el trabajo realizado a lo largo del presente proyecto. Sin embargo, como complemento para aquellos lectores interesados en

algunos detalles más concretos de lo que aquí se muestra, se incluye un desarrollo más exhaustivo del proceso en los anexos:

*Anexo I*, obtención de las ecuaciones del modelo matemático,

*Anexo II*, enfoque del problema de dispersión,

*Anexo III*, modelado 3D y mallado,

*Anexo IV*, código del *solver* y de ficheros de caso,

*Anexo V*, resultados del cálculo computacional.

En cuanto a la *Memoria*, ésta está estructurada en 6 capítulos.

El primero de ellos expone las razones que han motivado el desarrollo de este proyecto y los objetivos que se pretenden alcanzar, mientras que el problema se pone en contexto en el capítulo 2.

El capítulo 3 muestra el conjunto de estudios efectuados sobre distintos parámetros que intervienen en el proceso, indicando los casos propuestos y simulados en cada uno de ellos. También incluye el proceso de validación del modelo.

En el capítulo 4 se explican todos los pasos de la metodología específica de trabajo necesaria para plantear y resolver problemas de este tipo.

El capítulo 5 muestra un resumen de todos los resultados obtenidos, de los cuales se realiza un análisis y se extraen unas conclusiones que se comentan en el capítulo 6.

## Capítulo 2

### 2 Enfoque del problema

Las limitaciones de los modelos matemáticos y semi-empíricos utilizados hasta hace poco en estudios sobre la calidad del aire urbano han impedido análisis detallados sobre la dispersión de contaminantes a escalas cercanas y con complejas configuraciones de edificios. Esto ha propiciado el uso de la Dinámica de Fluidos Computacional (CDF) como herramienta de predicción, sustituyendo incluso a ensayos de túnel de viento.

Este método consiste en resolver numéricamente la ecuación de transporte de la concentración a partir del campo de velocidades obtenido de las ecuaciones de Navier-Stokes.

La diversidad de las escalas que intervienen en el proceso de dispersión, donde existen distintos efectos que predominan de forma diferente en cada una, hace que cada modelo deba ser planteado específicamente en función del nivel de detalle necesario. Así, a escalas globales, donde predomina el transporte horizontal, no se puede determinar el efecto de cada edificio aislado en el proceso. Si se desea hacer esto, habrá que situarse en una región situada en un rango corto alrededor del punto de emisión, y así poder captar los efectos del transporte vertical. En este proyecto se analizarán casos a escala local de edificios aislados y calles.

Una explicación más minuciosa del contexto de la dispersión de contaminantes, así como el marco del modelado de problemas de este tipo hasta llegar a los modelos CFD, puede seguirse en el *Anexo II*.

#### 2.1 Modelo CFD

Como se ha dicho, un modelo CFD se refiere a la resolución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes y de transporte de un escalar en una geometría dividida en celdas computacionales discretas.

La característica principal del modelado de este tipo de problemas es la existencia del fenómeno de turbulencia, explicado en el punto 5 del *Anexo I*. De aquí se derivan tres enfoques fundamentales: DNS, LES y RANS, en cada uno de los cuales hay una distinta cantidad y tipo de aproximaciones en el modelo turbulento.

Aquí se usará un modelo tipo RANS para la turbulencia, concretamente el SST k-omega, que añade ecuaciones que completan el sistema de ecuaciones principal, formado por las que se muestran a continuación, y cuya obtención se muestra en el *Anexo I*.

#### Ecuación de Navier-Stokes para flujos incompresibles con densidad variable

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{2}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \quad \text{Ec. 2.1}$$

#### Ecuación de continuidad para flujos incompresibles con densidad variable

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \text{Ec. 2.2}$$

#### Ecuación del transporte de fracción másica

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho D_S \nabla S) + q_S \quad \text{Ec. 2.3}$$

#### Ecuación de la densidad

$$\frac{1}{\rho} = \frac{S}{\rho_c} + \frac{1-S}{\rho_a} \quad \text{Ec. 2.4}$$

Estas ecuaciones se basan en las hipótesis siguientes:

- El fluido del medio (aire) es newtoniano e incompresible, pero presenta variación de densidad por efecto de la presencia de un contaminante.
- Dicho contaminante no reacciona químicamente ni sufre otro tipo de cambios, sino que simplemente se propaga

Además del modelo matemático que describe el comportamiento del sistema, un modelo CFD se compone también de los siguientes elementos, descritos en el *Anexo II*.

- Un método de discretización, en este caso el de *volúmenes finitos*,
- Un sistema de coordenadas, en este caso *cartesianas*,
- Una malla numérica, resultado de la *discretización de la geometría* del problema,
- Aproximaciones finitas, o métodos de *discretización de las ecuaciones* mencionadas,
- Un algoritmo de resolución, que coordina todo lo anterior, y
- Criterios de convergencia, que controlan la eficiencia de dicho algoritmo.

## Capítulo 3

### 3 Simulaciones realizadas

Para asegurar la concordancia de los resultados finales con la realidad, primero se deberá realizar una validación del modelo numérico, lo cual se lleva a cabo en este caso mediante la comparación de resultados con otros obtenidos empíricamente en un túnel de viento.

Una vez realizado esto, se muestran una serie de análisis sobre la influencia de los dos parámetros que describen al gas contaminante en el procedimiento, y que aparecen en la ecuación que determina su comportamiento. Éstos son la *difusividad* y la *densidad*.

Posteriormente se han efectuado un número de simulaciones para observar la influencia de distintas geometrías en el proceso de transporte del gas.

Finalmente, se plantea el estudio de un caso potencialmente real: un escape de gas en el edificio Torres Quevedo del Campus Río Ebro de la Universidad de Zaragoza. En él, se tienen en cuenta varias de las direcciones de viento más comunes en la ciudad, y se recorre su rango típico de velocidades, para así cubrir el mayor número de posibilidades.

#### 3.1 Aspectos geométricos

En primer lugar, resulta evidente que el comportamiento de un contaminante transportado por una corriente de aire variará en gran medida en función de la forma, disposición y cantidad de obstáculos a los que esa corriente tenga que enfrentarse. Del mismo modo, no será lo mismo que dicho contaminante se genere a nivel del suelo que en una azotea, o junto a una pared que a cierta distancia de ella.

Por este motivo, el cálculo computacional se lleva a cabo en varios escenarios distintos, que se presentan a continuación dentro de cada estudio, y que tratan de analizar los efectos de las distintas complejidades geométricas que puede presentar un medio urbano, así como las diferencias entre varias posibles localizaciones de una fuente emisora de un contaminante.

#### 3.2 Validación del modelo

La validación del modelo se ha realizado por comparación de los datos obtenidos en un estudio experimental sobre la difusión de un gas detrás de un edificio aislado (1). Este se realizó a escala 1:500 en un túnel de viento de dimensiones 1,2 m de anchura, 1 m de altura, y 14 m de longitud en la dirección del flujo. El esquema se puede observar en la Figura 3.1.



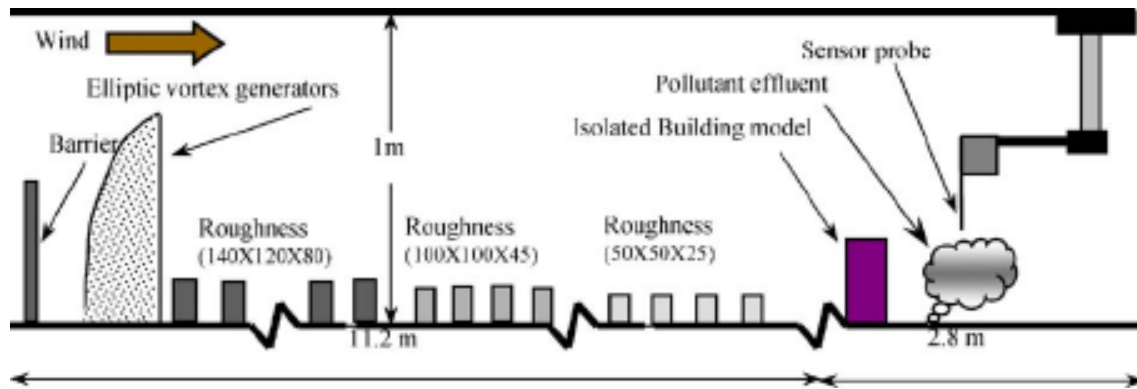


Fig. 3.1. Esquema de montaje del experimento en túnel de viento.

Los elementos situados a la izquierda del edificio aislado están dispuestos de manera que se genere un perfil de viento siguiendo la siguiente ley potencial:

$$U(Z) = \frac{U_{\infty}}{Z_{ref}^n} Z^n$$

Donde

- $Z$  es la coordenada vertical desde el nivel del suelo.
- $n$  es el valor de la potencia, y se toma como  $1/4$ .
- $U_{\infty}$  es la velocidad del flujo libre, que se mantiene constante a partir de la altura  $Z_{ref}$ , de valor  $1,3 \text{ m/s}$ .
- $Z_{ref}$  es la altura a partir de la cual el perfil de velocidades se vuelve plano, y se ha tomado igual a  $0,6 \text{ m}$ .

El edificio tiene unas dimensiones de  $0,1 * 0,1 \text{ m}^2$  en su base, y una altura  $H = 0,2 \text{ m}$ .

Las direcciones se denominarán  $X$  para la dirección del flujo (longitudinal al túnel),  $Y$  para la dirección lateral, y  $Z$  para la vertical.

La emisión del gas se efectúa detrás del edificio a nivel del suelo a una distancia de él normalizada  $X/H = 0,125$ , y con una velocidad de emisión despreciable que no interfiere con el flujo principal.

El gas emitido,  $\text{C}_2\text{H}_4$ , tiene una densidad muy similar a la del aire, por lo que se toma como tal.

Las mediciones se realizan en 4 posiciones en la dirección  $X$ , que serán

$$X/H = 0,125 \quad X/H = 0,375 \quad X/H = 0,625 \quad X/H = 1,125$$

y desde las cuales se realizarán barridos en dirección  $Y$  y  $Z$  en varios puntos. Un esquema de esto se observa en la Figura 3.2.

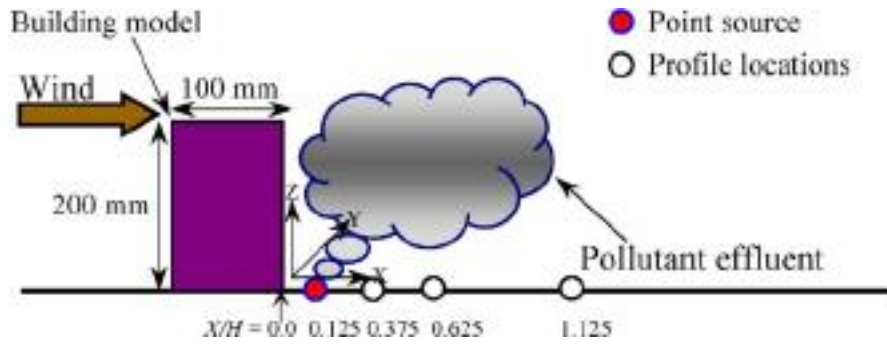


Fig. 3.2. Detalle de la zona de medición.

Los resultados que se mostrarán (capítulo 6) serán la media de las mediciones realizadas durante 60 segundos con una frecuencia de muestreo de 1 Hz.

Las variables que se registrarán durante las mediciones y que serán mostradas de forma normalizada en las gráficas serán:

- Las 3 componentes de la *velocidad* ( $U, V, W$ ), que se normalizarán de la siguiente forma:  $U/U_H$ ,  $V/U_H$ ,  $W/U_H$ , con  $U_H$  la velocidad de aproximación del flujo al edificio a la altura del edificio  $H = 0,2 \text{ m}$
- La *concentración*,  $C$ , que se normaliza como  $K = C/C_0$ , con

$$C_0 = \frac{q}{U_H H^2}$$

donde  $q$  es flujo de emisión del contaminante, en  $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$

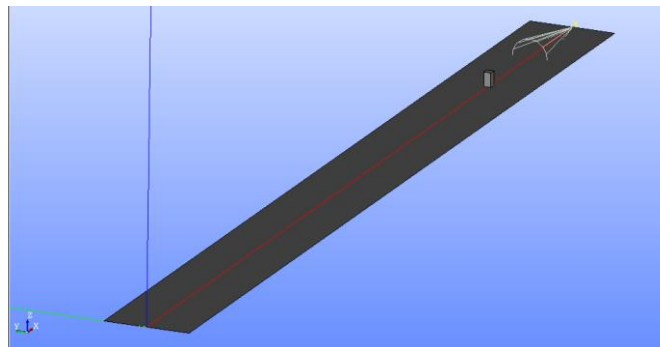


Fig. 3.3. Reproducción parcial del túnel de viento en el modelo CAD para la simulación.

### 3.3 Interacción con edificios

A continuación se presentan dos escenarios con el objetivo de percibir los efectos de la geometría en los flujos, y cómo afecta esto en el transporte del contaminante.

Se analizará la interacción de un contaminante con un edificio aislado en dos configuraciones, una con flujo perpendicular a una de las caras, y otra con flujo incidente diagonalmente a 45 grados. Ambas geometrías se muestran en las Figuras 3.4 y 3.5.

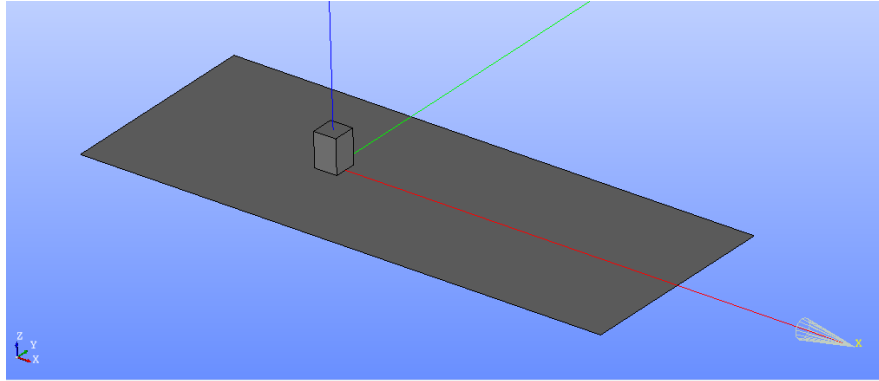


Figura 3.4. Edificio de *edificio aislado* con viento frontal

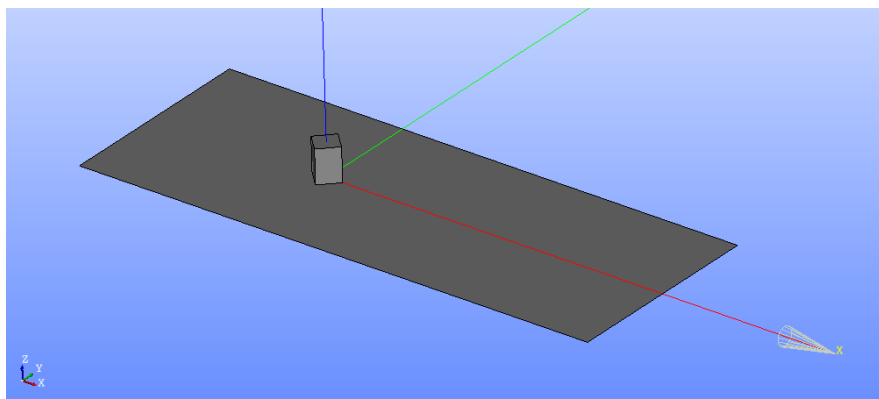


Figura 3.5. Escenario de *edificio aislado* con viento a 45 grados

### 3.4 Influencia de la difusividad del contaminante

El objetivo de este estudio será determinar si la difusividad del gas contaminante en el aire es un parámetro que influye apreciablemente en el comportamiento del escalar en casos de flujos en medios urbanos

Se observarán los resultados de dos situaciones, uno con una difusividad muy alta y otro con una muy baja. Los demás parámetros se mantendrán constantes en ambos escenarios.

La geometría que se propone consiste en un hipotético entramado de calles con edificios de diferentes alturas, y el contaminante será emitido desde una de las calles a nivel del suelo, arrastrado por un viento que incide diagonalmente sobre el conjunto de edificios.

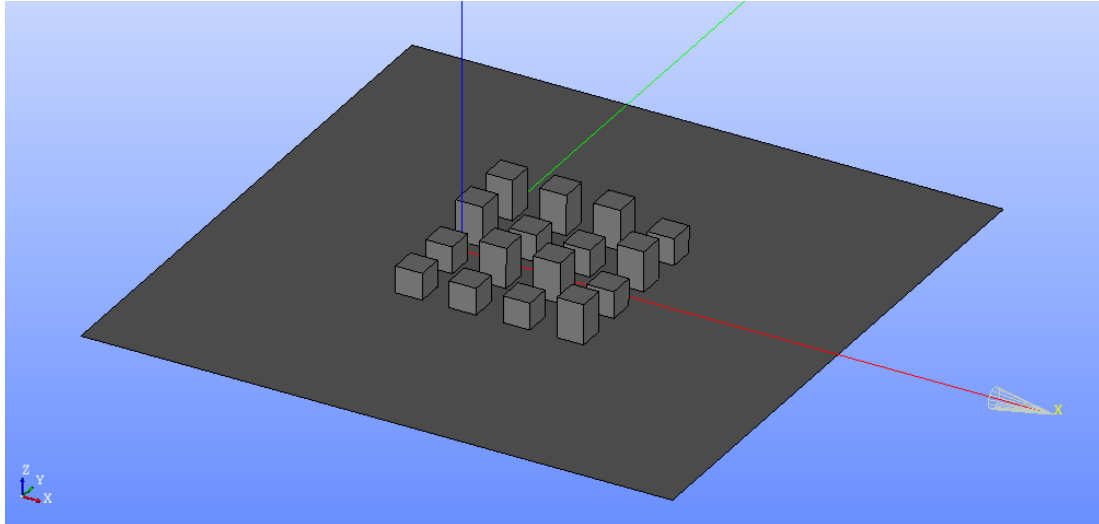


Fig. 3.6. Escenario de *entramado de calles*.

Podrá observarse así el comportamiento del gas en zonas donde la velocidad del flujo se reduce al pasar entre las calles, así como la conducta de los penachos que se desprendan y salgan por encima de la zona urbana.

### 3.5 Influencia de la densidad del contaminante

El segundo parámetro que definirá al gas que se quiera modelizar es su densidad. Como se ha visto anteriormente, esta densidad del contaminante afecta a la densidad del flujo en cada punto en función de su concentración, siguiendo la expresión

$$\frac{1}{\rho} = \frac{S}{\rho_c} + \frac{1-S}{\rho_a} \quad \text{Ec. 3.1}$$

El estudio de su influencia se realiza en una geometría que representa a una calle encajonada, representada en la Figura 3.7.

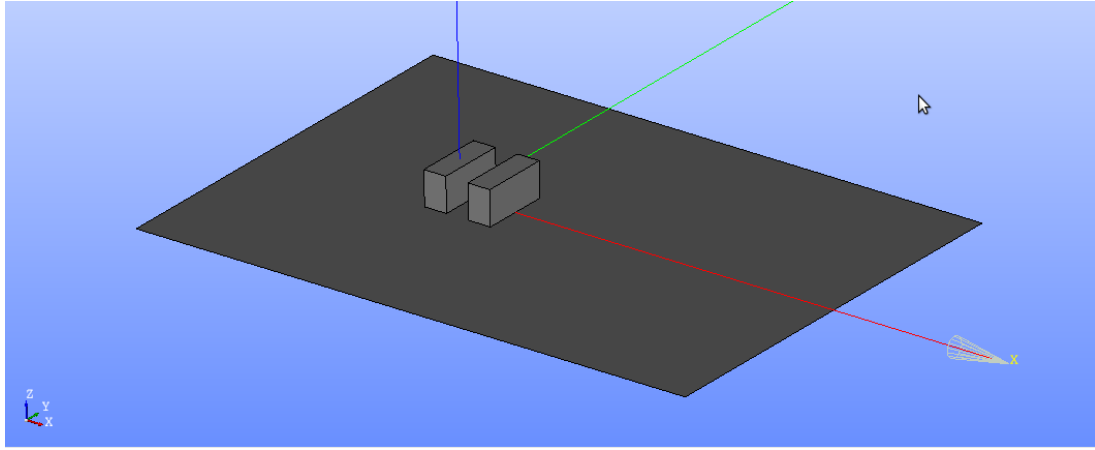


Fig. 3.7. Escenario de *calle encajonada*.

La emisión se realizará desde un punto situado a nivel del suelo en el centro de la calle, y la dirección del flujo principal de viento será perpendicular a la calle.

Se realizarán los tres ensayos siguientes

- Emisión de Helio, de densidad inferior a la del aire<sup>1</sup>  $\rho = 0,1785 \text{ kg/m}^3$ , a una velocidad de  $1 \text{ m/s}$
- Emisión de Hexafluoruro de azufre, de densidad superior a la del aire  $\rho = 6,164 \text{ kg/m}^3$ , a una velocidad de  $1 \text{ m/s}$
- Emisión de Hexafluoruro de azufre, de densidad superior a la del aire  $\rho = 6,164 \text{ kg/m}^3$ , a una velocidad de  $0,0289 \text{ m/s}$ , explicada a continuación.

En un primer análisis, se compararán las emisiones de dos gases de densidad muy diferente, con una velocidad de emisión idéntica.

En un segundo análisis, se considerará una cantidad de movimiento idéntica en el flujo de emisión para ambos gases, de manera que

$$\rho_{\text{Helio}} v_{\text{salida,Helio}} = \rho_{\text{Hexafluoruro}} v_{\text{salida,Hexafluoruro}}$$

Por tanto, se determina la velocidad de salida del hexafluoruro de azufre como

$$v_{\text{salida,Hexafluoruro}} = \frac{\rho_{\text{Helio}}}{\rho_{\text{Hexafluoruro}}} v_{\text{salida,Helio}} = \frac{0,1785}{6,164} 1 = 0,0289 \text{ m/s}.$$

---

<sup>1</sup>  $\rho_{\text{aire}} = 1,17 \text{ kg/m}^3$ , en condiciones normales.

### 3.6 Ejemplo de caso real: Edificio Torres Quevedo

Por último, se utilizará el modelo de simulación en una serie de ensayos donde se estudiará un hipotético caso real enmarcado en el edificio Torres Quevedo. En él, se supondrá que se ocasiona un escape de gas en su parte posterior durante un corto espacio de tiempo, y se determinarán las zonas que se verían afectadas, cuándo y durante cuánto tiempo. El suceso será representado en un rango de velocidades viento con direcciones y magnitudes típicas de la zona (cierzo en varias direcciones de 20 a 40 km/h y bochorno de 5 a 10 km/h).

Se utilizará un modelo simplificado del edificio, que puede verse en la Figura 3.8.

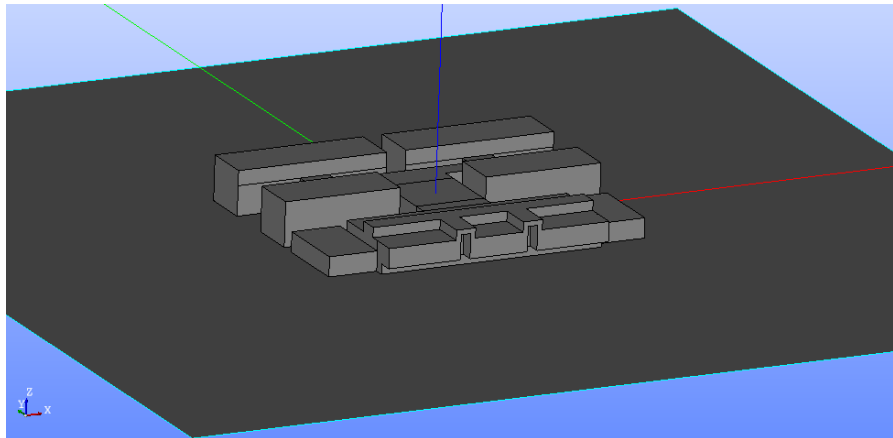


Fig. 3.8. Escenario del *edificio Torres Quevedo* simplificado.

## Capítulo 4

### 4 Procedimiento de análisis numérico

#### 4.1 Introducción

Una vez fijados los casos que pretenden estudiarse, la siguiente acción a realizar en el proceso de análisis consiste en el desarrollo y construcción de todos los elementos necesarios para poder llegar a realizar las simulaciones computacionales oportunas. Estos elementos no son otros que los modelos geométricos de cada zona urbana en cuestión, y la implementación del modelo matemático del sistema en forma de algoritmo, que el software *OpenFOAM* deberá ejecutar para obtener los resultados numéricos.

En un primer paso, se creará un modelo CAD tridimensional de la geometría del medio, para, seguidamente, discretizar su volumen en multitud de pequeños volúmenes de control o celdas, es decir, para crear el mallado. Esto se realiza mediante el software *Salome*.

El segundo paso consiste en codificar las ecuaciones del modelo matemático del comportamiento de un contaminante dentro de un flujo de aire para generar un *solver* o *resolvedor* que pueda ser usado a través de *OpenFOAM*.

En tercer lugar, se establecerá la estructura de archivos necesaria para albergar los distintos datos necesarios para iniciar la simulación, como son las condiciones iniciales y de contorno, los métodos de aproximación discreta de las ecuaciones, los criterios de convergencia, la malla numérica, las propiedades físicas del medio, las variables de control de la simulación, y otros.

Por último, los resultados numéricos obtenidos serán observados y analizados mediante el software de postprocesado *ParaView*.

#### 4.2 Obtención del modelo CAD y mallado

Una explicación más exhaustiva de estos procesos con sus particularidades puede seguirse en el *Anexo III*, mientras que aquí se darán solamente unas indicaciones generales.

Para comenzar, a partir de las dimensiones reales de la zona urbana de la que haremos el estudio, se construye un modelo tridimensional simplificado del volumen que ocupa el aire alrededor de los edificios del escenario. Para ello se utilizan las herramientas del módulo *Geometry* del software *Salome*, que se encarga de la creación y gestión de modelos CAD.

El resultado tendrá la apariencia de un paralelepípedo con un conjunto de oquedades en su cara inferior, que tendrán la forma y la distribución de la zona urbana mencionada. Un ejemplo de esto puede observarse en la Figura 4.1.

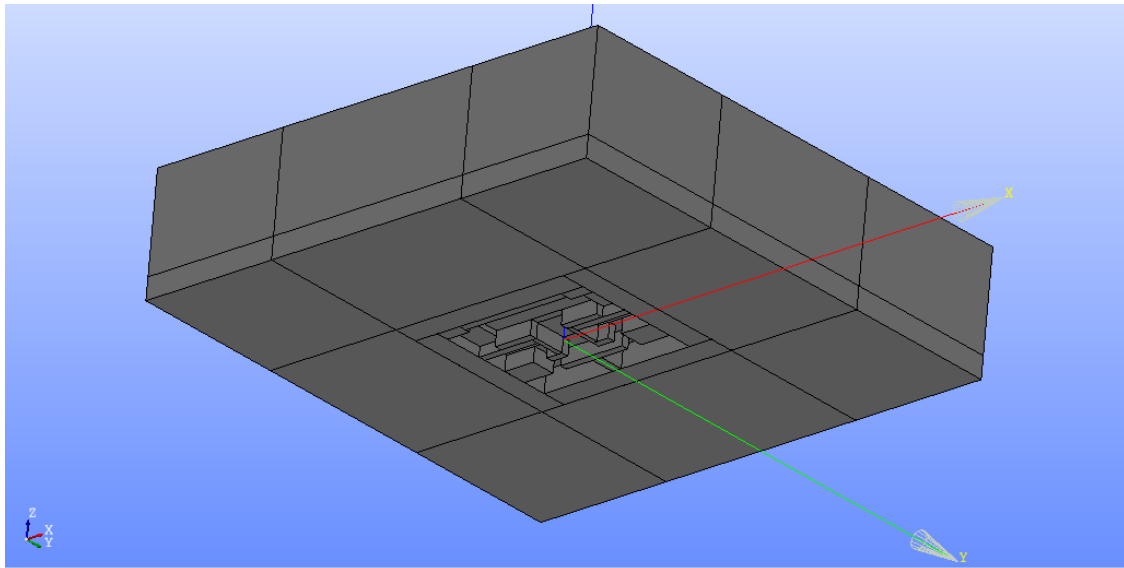


Figura 4.1. Modelo CAD del volumen de aire alrededor del *edificio Torres Quevedo*, visto desde su cara inferior.

Tras obtener el modelo CAD, el siguiente paso consiste en su discretización, es decir, la obtención de una malla de su geometría. Para ello se utiliza el módulo *Mesh* de *Salome*.

La malla se realiza a base de elementos hexaédricos por cuestiones de estabilidad. El mallado final resultante es más fino en la zona más interna, y más basto conforme se aleja de la zona urbana, con el fin de ahorrar recursos computacionales en procesos posteriores. Esto se consigue realizando un mallado de tipo estructurado por bloques, que como se ha visto en el apartado 2.3.4, asegura la continuidad de los elementos de la malla. Un ejemplo muestra en la Figura 4.2.

Como complemento final al proceso de mallado se definen varios grupos formados por superficies externas de la malla, cada uno de los cuales se denomina *patch*, y que servirán para asignar las condiciones de contorno posteriormente antes de iniciar el proceso de cálculo.

Por último, esta malla se exporta en forma de archivo con formato compatible con el software *OpenFOAM*, para que pueda reconocerla durante la simulación.



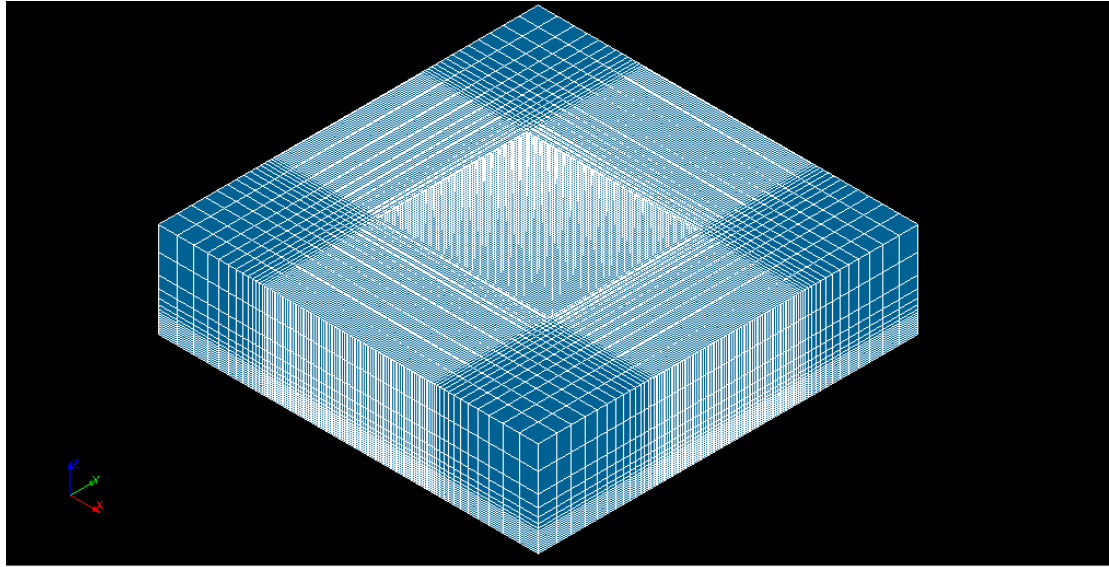


Figura 4.2. Malla final del modelo del *edificio Torres Quevedo*.

## 4.3 Cálculo computacional

A continuación se describen los pasos a seguir para realizar las distintas simulaciones numéricas al mallado obtenido anteriormente.

Como se ha indicado, el software de cálculo utilizado es *OpenFOAM*, de uso libre.

### 4.3.1 Consideraciones iniciales

El objetivo principal de este proyecto es analizar el comportamiento de un contaminante liberado en un entorno urbano bajo la acción del viento. Por este motivo es necesario un modelo matemático que represente fielmente la conducta del aire en una situación de este tipo, y que además incorpore al contaminante en cuestión.

*OpenFOAM* ofrece de serie una amplia variedad de aplicaciones o *solvers* diseñados para resolver problemas específicos (flujo laminar/turbulento, compresible/incompresible, flujo monofásico/multifásico, flujo transitorio/estacionario, ... ).

La forma aconsejable de proceder consiste en buscar el *solver* que más se adapte al problema en cuestión y, si fuera necesario, modificar su código hasta conseguir lo que se busca.

Una vez definido el *solver* a utilizar, el siguiente paso será crear una serie de archivos que, junto con la malla creada anteriormente, den forma al problema o *caso*. Son estos archivos los que contienen los datos necesarios para que el *solver* pueda calcular y dar resultados, e incluyen información como las condiciones de contorno y los parámetros de los distintos métodos de cálculo que utiliza, entre otros.

### 4.3.2 Creación del solver

El primer paso en la creación de un *solver* o algoritmo numérico que se ajuste a las necesidades del problema es buscar uno existente que sea lo más cercano posible a lo que se requiere.

Para ello, hay que identificar el tipo de problema físico a resolver. OpenFOAM ofrece categorías como flujo ideal, potencial, incompresible, compresible, multifásico, seguimiento de partículas, transferencia de calor y flujos de convección natural, métodos de movimientos moleculares,... y otros fuera del ámbito de la física de medios fluidos.

En este caso se trata de un flujo incompresible monofásico, con la particularidad de la presencia de un escalar que representa la fracción másica del contaminante que será transportado dentro del flujo de aire. Así pues, tras un análisis de los modelos disponibles, se selecciona un *solver* para flujo compresible, de entre los cuales el más indicado es el llamado *rhoPimpleFoam*.

Este solver resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos compresibles, pero no incluye el modelo matemático que simule el transporte de un contaminante. Así pues, se deberá modificar y completar el *solver* seleccionado para eliminar la compresibilidad debida a los cambios de presión y que incluya el efecto de la densidad variable.

El código del *solver* puede consultarse en el *Anexo IV*.

#### 4.3.2.1 Modificaciones

Como se ha explicado en el capítulo 2, se trata de un flujo incompresible con densidad variable, debido a la presencia de un escalar con densidad distinta a la del aire, aunque las velocidades que se manejan son subsónicas.

Partiendo pues del *solver pimpleFoam*, es necesario incorporar en él el modelo de transporte de un contaminante, además de incluir el efecto del mismo en la densidad.

En este caso, se trata de un contaminante inerte que no va a reaccionar químicamente con el aire. Esto se deja para posibles futuros proyectos.

La primera modificación consiste en definir un escalar, que se denominará  $S$ , que designe la fracción másica del contaminante en cada punto, y aplicarle la ecuación de transporte, que, como puede consultarse en el *Anexo I*, es:

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho D_S \nabla S) + q_S \quad \text{Ec. 4.1}$$

El escalar  $S$  se define entre 0 y 1, lo cual representará la proporción de contaminante en cada punto. Por tanto, la proporción de aire en ese punto será  $1 - S$ .

De este modo, para crear una fuente del contaminante bastará con definir una zona del mallado, de superficie  $A_{emisión}$ , donde  $S$  tenga valor unidad y desde donde difunda hacia el

resto del dominio con una velocidad de emisión determinada. Así, el flujo de masa de contaminante emitida se puede calcular como

$$\dot{m} = \rho_{emisión} \cdot v_{emisión} \cdot A_{emisión} [kg/s]$$

El modelo recién incorporado no diferencia entre la de densidad del aire y la del contaminante y hace a éstos indistinguibles (el modelo en realidad considera que en el dominio sólo hay aire, a través del cual se transporta un escalar), por lo que es necesaria una segunda modificación del *solver rhoPimpleFoam* que elimine esta limitación para poder simular contaminantes con una densidad diferente a la del aire.

Para ello, se añade en el modelo matemático la ecuación que controla el comportamiento de la densidad del flujo en cada punto en función de la concentración de contaminante. Como se ha visto en el capítulo 2, esta ecuación es

$$\frac{1}{\rho} = \frac{S}{\rho_c} + \frac{1-S}{\rho_a} \quad \text{Ec. 2.6}$$

Esto implica que hay que eliminar del modelo la relación entre las variaciones de presión y la densidad, que sería lo propio de un flujo compresible *sin* transporte de escalar alguno. Esta eliminación no produce ningún cambio significativo en el modelo, pues el flujo es por sí mismo incompresible (obviando el efecto del escalar) debido a las bajas velocidades del mismo, como se explica en el apartado 5.2 del *Anexo I*.

Finalmente, para poder utilizar el *solver* es necesario compilarlo bajo otro nombre, que en este caso es el de *myRhoPimpleFoam*, creándose el archivo ejecutable correspondiente.

### 4.3.3 Creación del caso. Estructura de archivos

El software *OpenFOAM* no trabaja a través de una interfaz de usuario típica, sino que se basa en la creación de una serie de archivos que describen el problema y que contienen los parámetros necesarios para su resolución.

Para que el cálculo pueda iniciarse y se ejecute sin problemas, es necesario que dichos archivos contengan la información necesaria y estén dispuestos según una estructura específica dentro de la carpeta del *caso* a resolver. En la Figura 4.3 se muestra un esquema de dicha estructura básica.

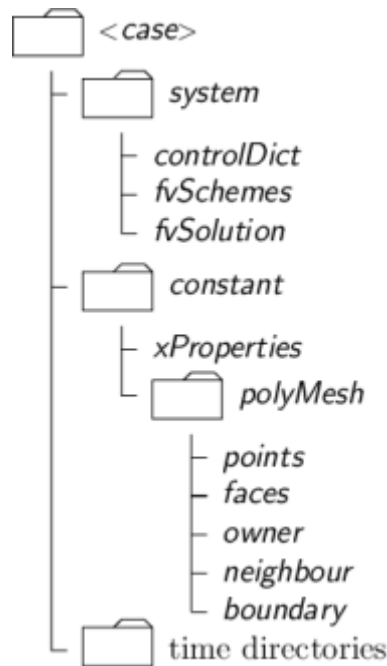


Figura 4.3. Estructura de archivos de un caso de *OpenFOAM*.

La carpeta llamada *case* es el directorio donde se encuentran todos los demás archivos y subdirectorios del estudio. Se le puede dar el nombre que se desee, pues sirve para identificar el problema en el que se está trabajando. Dentro de este directorio deben existir los subdirectorios *system*, *constant* y los *time directories*.

Dentro de *system* se encuentran los ficheros de texto que contienen los parámetros asociados al proceso de resolución numérica. Estos ficheros son, al menos, *controlDict*, *fvSchemes* y *fvSolution*.

El archivo *controlDict* se encarga de los parámetros de control de la ejecución, como son el tiempo de inicio y de fin de ejecución, el paso temporal y las tareas de monitorización de datos. Por otro lado, en *fvSchemes* se determinan los esquemas de discretización a utilizar en el proceso de cálculo. Y por último, en *fvSolution* se especifican los *solvers* para cada una de las ecuaciones del modelo, las tolerancias, los coeficientes de relajación y otros controles de algoritmo.

El subdirectorio *constant* contiene la carpeta *polyMesh*, con una descripción completa del mallado por medio de los ficheros *points*, *cells*, *faces*, *neighbour*, *owner* y *boundary*, que contienen la información relativa a los elementos geométricos de la malla, su posición en el espacio y las relaciones entre ellos. Estos ficheros se crean automáticamente en el proceso de exportación del mallado de *Salome* a *OpenFOAM*.

Además, en este subdirectorio se incluye una serie de archivos que contienen las propiedades físicas relativas al análisis numérico a realizar. Estos archivos y su contenido pueden variar mucho de un problema a otro, ya que dependen del *solver* global que se esté utilizando para realizar los cálculos.

Finalmente, los *time directories* contienen la información de los campos de todas las variables físicas definidas en el problema para distintos instantes de tiempo. Cada uno de estos directorios recibe su nombre directamente del valor del tiempo (en segundos) sobre el cual contienen información. Por ejemplo, el fichero temporal designado como *0* contiene los valores iniciales y condiciones de contorno de las distintas variables que participan en la simulación. Estas condiciones iniciales deben ser proporcionadas por el usuario, y se explican en el siguiente punto.

Por otra parte, el resto de directorios temporales (como podrían ser los llamados *1*, *15*, *60* ó *300*) son el resultado de los cálculos realizados en instantes posteriores al tiempo *0*, y son generados automáticamente por OpenFOAM conforme avanza la simulación.

### 4.3.3.1 Importación de la malla

Uno de los conjuntos de datos indispensables a la hora de comenzar la simulación es, obviamente, la geometría en forma de malla que se ha obtenido mediante el software *Salome*. Sin embargo, el archivo generado no puede ser directamente utilizado por *OpenFOAM*, sino que necesita de un proceso de conversión a otro formato que éste pueda reconocer. En este caso, mediante una aplicación específica del paquete de OpenFOAM, se transforma el archivo en formato *.unv*, proveniente de *Salome*, en todo el conjunto de ficheros que describen la malla dentro del caso, en el fichero */constant/polyMesh*.

Una vez hecho esto, la malla ya existe dentro del caso y puede ser incluso inspeccionada por el software de postprocesado.

### 4.3.3.2 Condiciones iniciales y de contorno

La asignación de condiciones iniciales se realiza en dos partes. Por un lado, debe definirse el *tipo básico* de frontera correspondiente a cada *patch* de la geometría, es decir, a cada conjunto de superficies exteriores. Algunos de estos tipos a elegir son: superficie sólida (*wall*), plano de simetría (*symmetry*), superficie cíclica (*cyclic*) o el tipo por defecto (*patch*). En este caso, sólo es necesario definir las superficies sólidas, que serán las correspondientes a las superficies sólidas de la geometría del caso en la realidad, es decir, los edificios y el terreno.

Por otro lado, es necesario asignar los tipos de valores de contorno y su valor inicial de cada una de las variables en el directorio temporal */0* (instante inicial), así como los valores iniciales de todos los nodos internos de la malla, que no pertenecen a ningún *patch*. Estos tipos pueden consultarse en el apartado 2 del *Anexo IV*.

#### 4.3.3.3 Propiedades físicas

Los valores de parámetros considerados constantes como la viscosidad, la difusividad, la densidad del aire y del contaminante, y otros coeficientes, se encuentran en el fichero llamado *transportProperties*, cuyo contenido puede verse en el apartado 2 del *Anexo IV*.

#### 4.3.3.4 Métodos de discretización

Los métodos de discretización de ecuaciones se especifican en el fichero llamado *fvSchemes*, que permite seleccionar el método para cada miembro de cada ecuación, según se trate de derivadas, gradientes, divergencias, laplacianos o interpolaciones, por ejemplo. Este fichero puede verse en el apartado 2 del *Anexo IV*.

#### 4.3.3.5 Tolerancia y criterios de convergencia

El fichero *fvSolution* contiene los valores de tolerancia y criterios de convergencia de cada una de las variables que se calculan durante la simulación. Puede observarse en el apartado 2 del *Anexo IV*.

#### 4.3.3.6 Variables de control de la simulación

En el fichero llamado *controlDict* se encuentran parámetros como la duración del tiempo calculado en la simulación, el incremento de tiempo entre una iteración y la siguiente, la frecuencia de registro de datos y su precisión, y las coordenadas de los puntos de la geometría sobre los que se quiere hacer un seguimiento especial del valor que toman ciertas variables. Puede verse en el apartado 2 del *Anexo IV*.

### 4.3.4 Proceso de cálculo

Una vez creados el *solver* y toda la estructura de directorios, incluyendo la malla exportada de *Salome* a *OpenFOAM*, las condiciones de contorno y los valores iniciales del directorio temporal *0*, se está en disposición de iniciar el proceso de cálculo.

Para que la simulación converja más rápidamente, como un paso previo se utiliza el solver llamado *potentialFoam*, que resuelve el campo de velocidades para un flujo potencial. Éste se usa como campo inicial de velocidades, en lugar de un valor constante nulo, que provocaría un arranque más brusco. Además, la simulación se deja correr durante un tiempo hasta que el flujo se estabilice y no quede rastro del campo inicial basado en un flujo potencial. Es entonces cuando se activa la emisión del contaminante y comienza la simulación real.

Durante este proceso se van generando sucesivos ficheros temporales a intervalos definidos en *controlDict*, además de mostrarse en pantalla información en tiempo real de la simulación iteración tras iteración, con la que se puede controlar que el proceso numérico es estable.

Este proceso termina transcurrido el tiempo de simulación definido también en *controlDict*.

#### **4.3.5 Resultados**

Los resultados se almacenan en directorios nombrados según el instante temporal (en segundos) del que guardan información. En cada uno de ellos existe un archivo de texto para cada variable con los valores que toma en todos los puntos del dominio.

### **4.4 Visualización de resultados**

El último paso del procedimiento de análisis numérico consiste lógicamente en observar y analizar el producto final de todo el trabajo desarrollado.

Para visualizar gráficamente los resultados se utiliza el software *paraview*, que funciona como una extensión propia de *OpenFOAM*. Este programa se ocupa de leer e interpretar los datos almacenados en los sucesivos ficheros temporales para después representar las distintas variables en la geometría del problema.

Entre otras cosas, pueden realizarse representaciones de campos vectoriales, escalares, líneas de corriente, isolíneas/isosuperficies, tanto tridimensionales como bidimensionales por medio de cortes.

En el siguiente capítulo pueden verse los resultados de varias de las simulaciones realizadas. El resto de ellos se encuentra en el *Anexo V*.

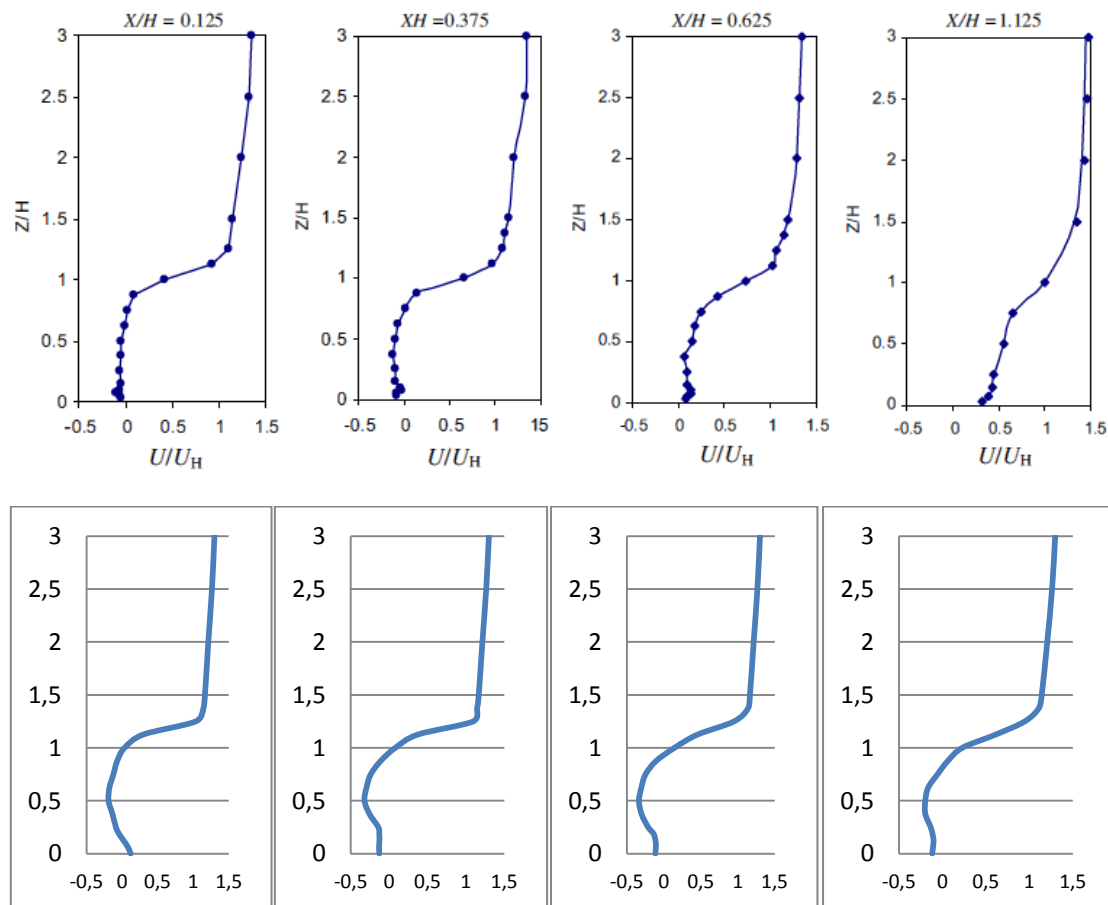
## Capítulo 5

### 5 Resultados finales y comparación

#### 5.1 Validación del modelo

Con objeto de la validación del modelo numérico desarrollado, se presentan los resultados obtenidos en túnel de viento, comparándolos con aquellos obtenidos en una simulación que emula al mismo experimento real.

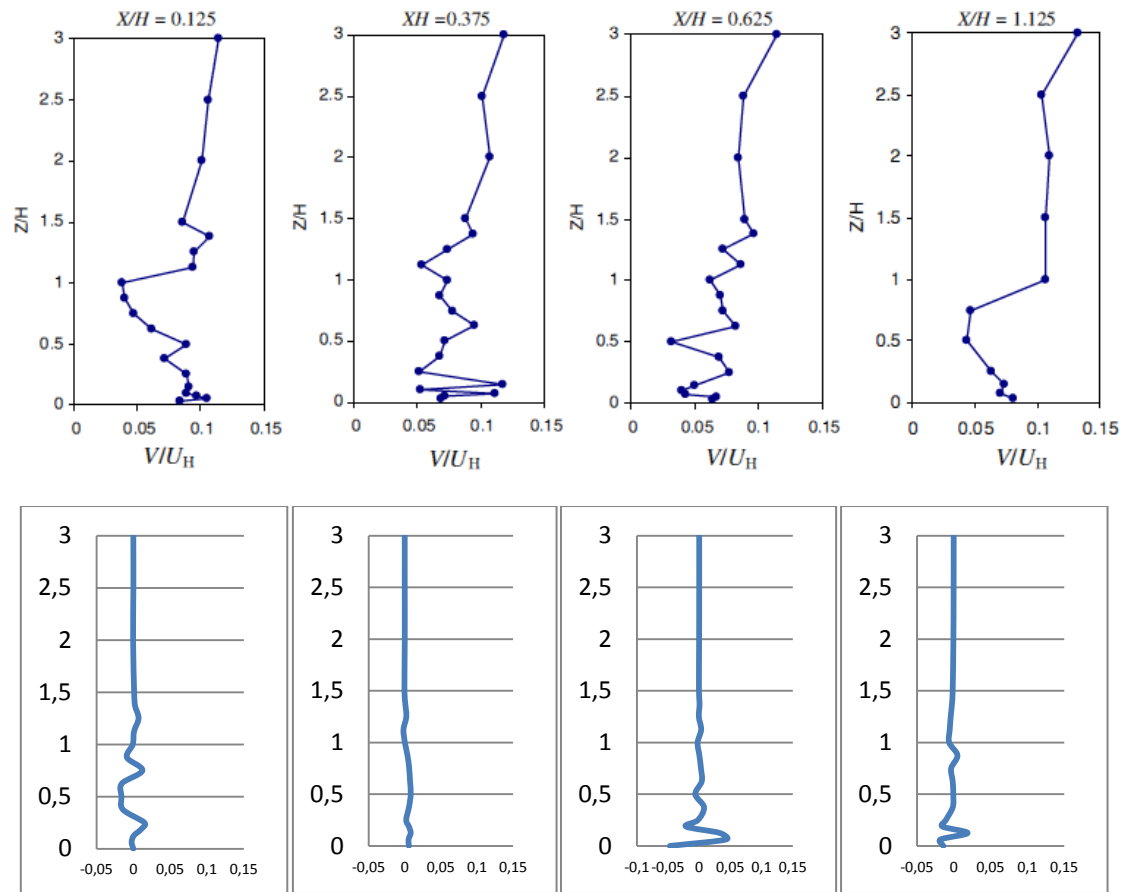
##### 1) Componentes medios de la velocidad



**Figura 5.1.** Velocidad media normalizada en dirección longitudinal, en túnel de viento (arriba) y simulación (abajo)

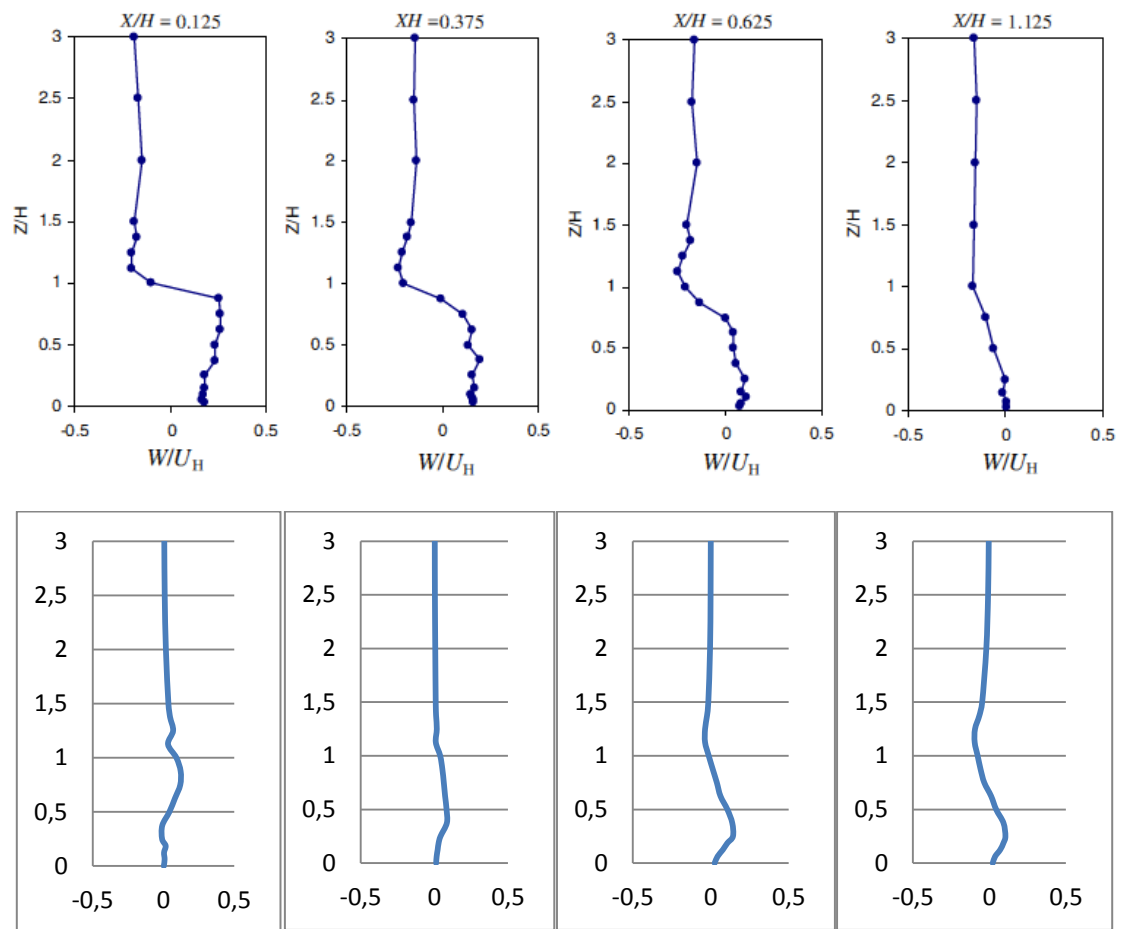
Como puede observarse en la Figura 5.1, los perfiles de velocidad en la dirección del viento están predichos por el modelo razonable.





**Figura 5.2.** Velocidad media normalizada en dirección lateral, en túnel de viento (arriba) y simulación (abajo)

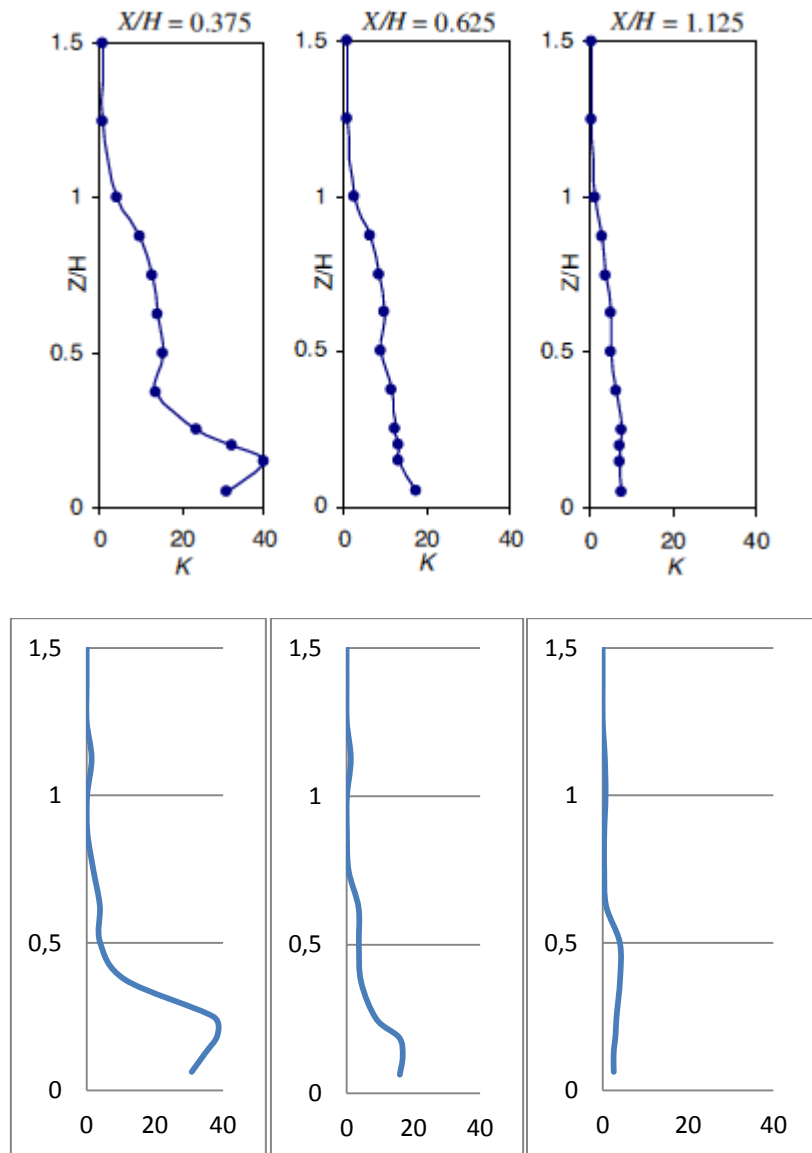
En este caso, las velocidades laterales, mostradas en la Figura 5.2, no coinciden. Mientras que en el experimento en el túnel de viento, aunque sean pequeñas, éstas existen, la simulación predice que son prácticamente nulas, con muy pequeñas oscilaciones. Esto es debido a que el caso simulado es perfectamente simétrico, por lo que no tiene sentido que aparezca velocidad horizontal a través del plano vertical central, salvo por pequeñas oscilaciones numéricas.



**Figura 5.3.** Velocidad media normalizada en dirección vertical, en túnel de viento (arriba) y simulación (abajo)

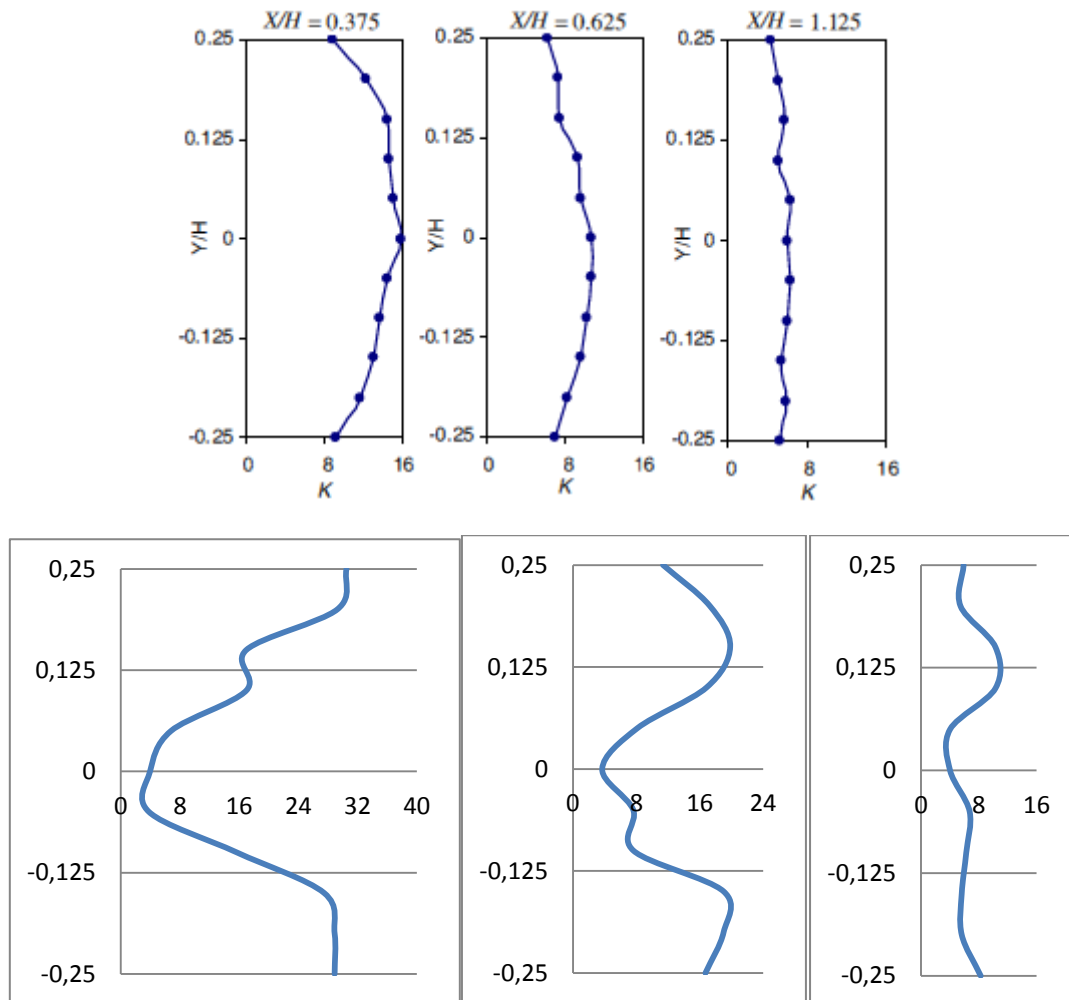
En la Figura 5.3 puede verse que, cerca del edificio, la predicción de la velocidad vertical no es acertada.

## 2) Concentraciones medias



**Figura 5.4.** Perfiles verticales de concentración media normalizada, en túnel de viento (arriba) y simulación (abajo)

La Figura 5.4 muestra que los perfiles verticales de concentración son bastante acertados, debido a que el perfil de velocidad en dirección del viento es también predicha con precisión.



**Figura 5.5.** Perfiles laterales de concentración media normalizada, en túnel de viento (arriba) y simulación (abajo)

Finalmente, se puede observar en la Figura 5.5 que las concentraciones laterales sufren los efectos de una mala predicción de ciertos perfiles de velocidad, y distan de ser parecidas entre los dos casos, aunque el orden de magnitud no sea muy distinto.

Por tanto, se concluye que, aunque no con un perfil exacto, el modelo es capaz de predecir el orden de magnitud, al menos, de la concentración, con mayor exactitud de forma lateral cuanto más aguas abajo del edificio se realice la predicción.

## 5.2 Interacción con edificio aislado

Como primer ensayo de una aplicación real, se realizan dos simulaciones sobre el escenario correspondiente a un penacho de contaminante incidiendo sobre un edificio aislado, con distinta orientación en cada caso. En el primero de ellos el flujo incide frontalmente sobre una de las caras del edificio, mientras que en el segundo lo hace sobre una esquina, con una diferencia de 45 grados respecto al primer caso. El edificio tiene unas dimensiones de base de 20 x 20 metros, y una altura de 30 metros.

Las Figuras 5.6 y 5.7 muestran la forma de la isosuperficie  $S=0,01$  del penacho resultante en ambos casos a los 300 segundos de iniciarse la emisión, desde cierta distancia delante del edificio a nivel del suelo, y con un viento de 3 m/s en dirección longitudinal.

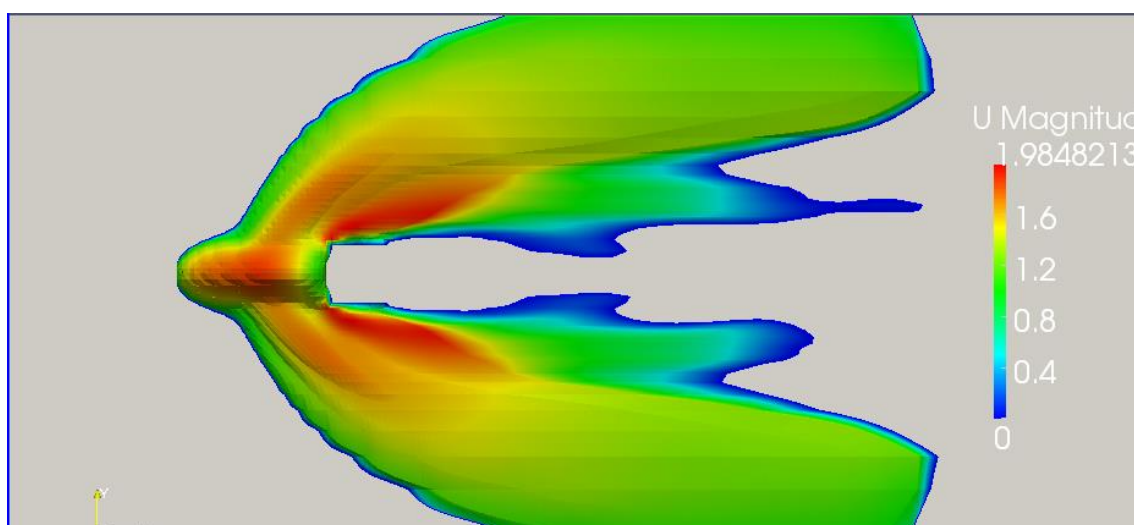


Figura 5.6. Edificio aislado, flujo frontal. Iso-superficie  $S=0.01$  en  $t=300s$

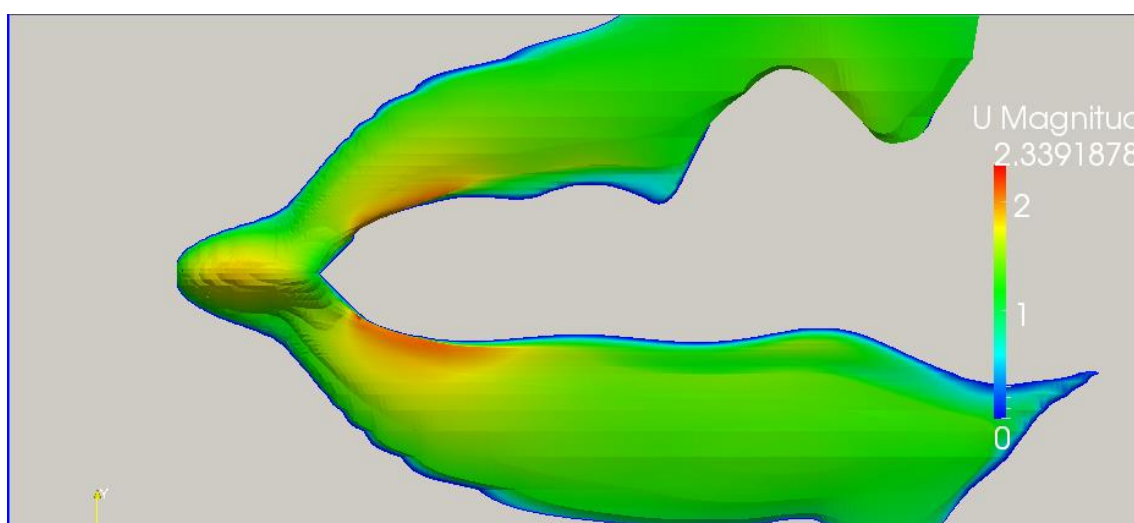


Figura 5.7. Edificio aislado, flujo en diagonal. Iso-superficie  $S=0.01$  en  $t=300s$

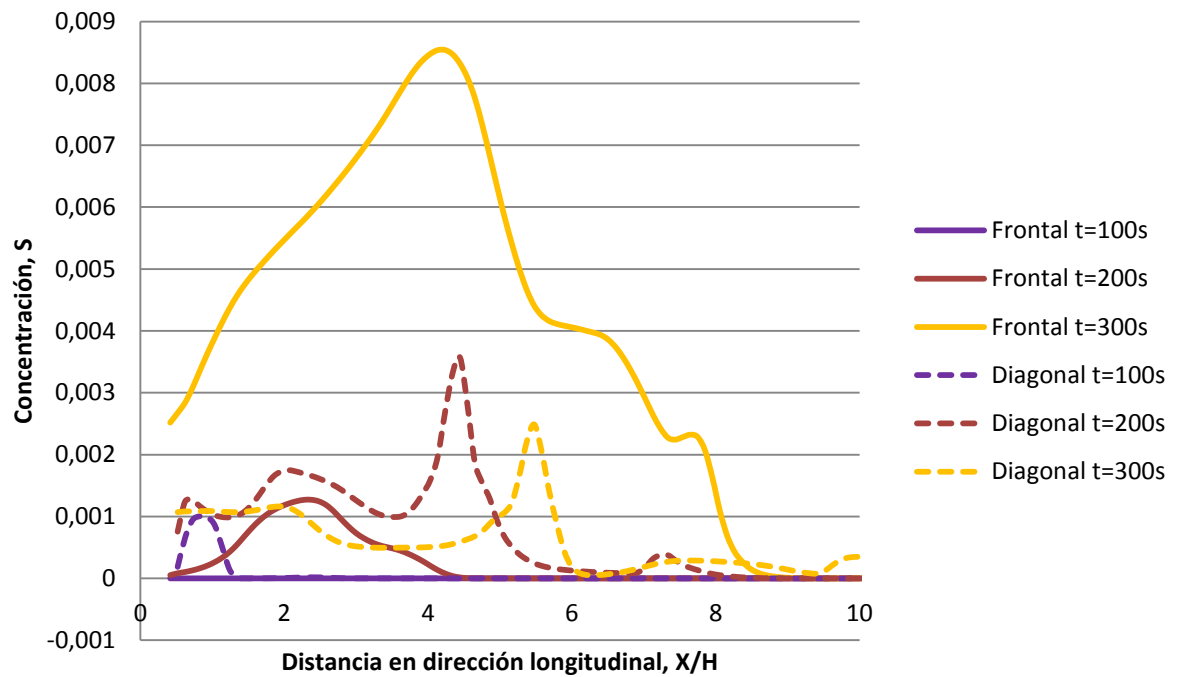


Figura 5.8. Edificio aislado, concentraciones en dirección longitudinal en 3 instantes de tiempo desde el inicio de emisión, con flujo frontal (líneas continuas) y con flujo en diagonal (líneas de puntos)

Como puede observarse en las Figuras 5.6 y 5.7, la diferencia más apreciable entre ambos casos es que la estela en el caso de incidencia a 45 grados es más ancha, por lo que la zona situada aguas abajo puede parecer más protegida que si el viento incide perpendicularmente. Es necesario analizar la Figura 5.8 para esclarecer esto.

La Figura 5.8 que muestra el nivel de concentración en la línea longitudinal aguas abajo del edificio hasta una distancia de 10 veces su altura ( $X/H = 10$ ).

A los 100 segundos del inicio de la emisión, el flujo con choque en diagonal proporciona una concentración de  $S = 0,001$  a una distancia de  $X/H = 1$ , aproximadamente, mientras que si el flujo choca frontalmente, la concentración se puede considerar nula.

A los 200 segundos, el flujo diagonal provoca un máximo de concentración de  $S = 0,0035$  en  $X/H = 4,4$ , aproximadamente, mientras que el flujo diagonal sólo llega a  $S = 0,0011$  en  $X/H = 2,3$ .

Por último, a los 300 segundos, el flujo en diagonal no ofrece una variación muy significativa de la máxima en el perfil de concentraciones, mientras que en el caso de choque frontal, presenta una zona mucho más amplia con una concentración incluso ocho veces mayor.

Se concluye pues que, a largo plazo, una incidencia frontal del viento produce una acumulación de contaminante mayor detrás del edificio, provocada por la zona de remanso que se genera, la cual no existe si el flujo incide diagonalmente sobre una de las esquinas del edificio.

### 5.3 Estudio del efecto de la difusividad

En este punto se muestran los resultados de las simulaciones con las que se pretende determinar la influencia de uno de los parámetros que definen a un contaminante, la difusividad. En un caso se utiliza un valor varios órdenes de magnitud por encima de los valores típicos (del orden de  $10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ ), mientras que, en otro, lo está varios órdenes de magnitud por debajo.

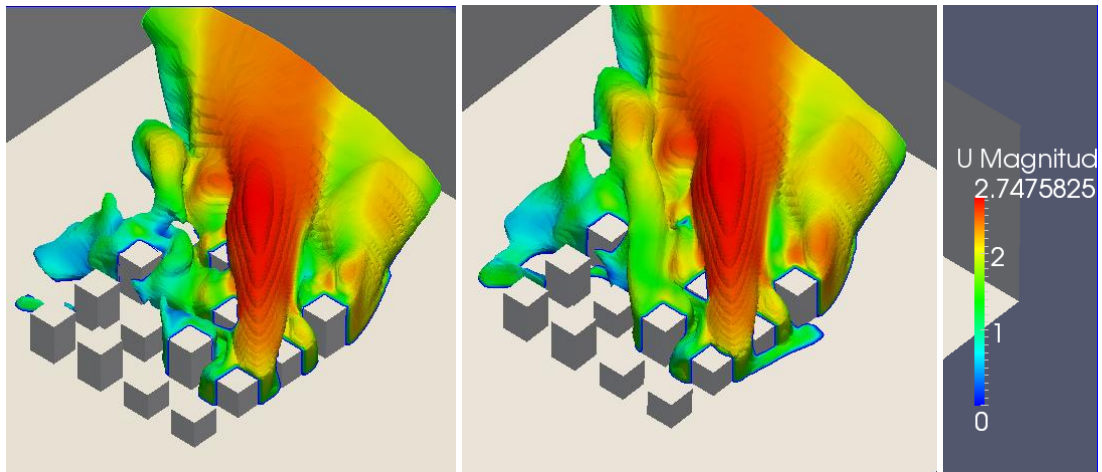


Figura 5.9. Iso-superficie  $S=0,0001$ , difusión de un gas de difusividad  $D=10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$  (izquierda) y  $10^{-1} \text{ m}^2/\text{s}$  (derecha), en  $t=600\text{s}$

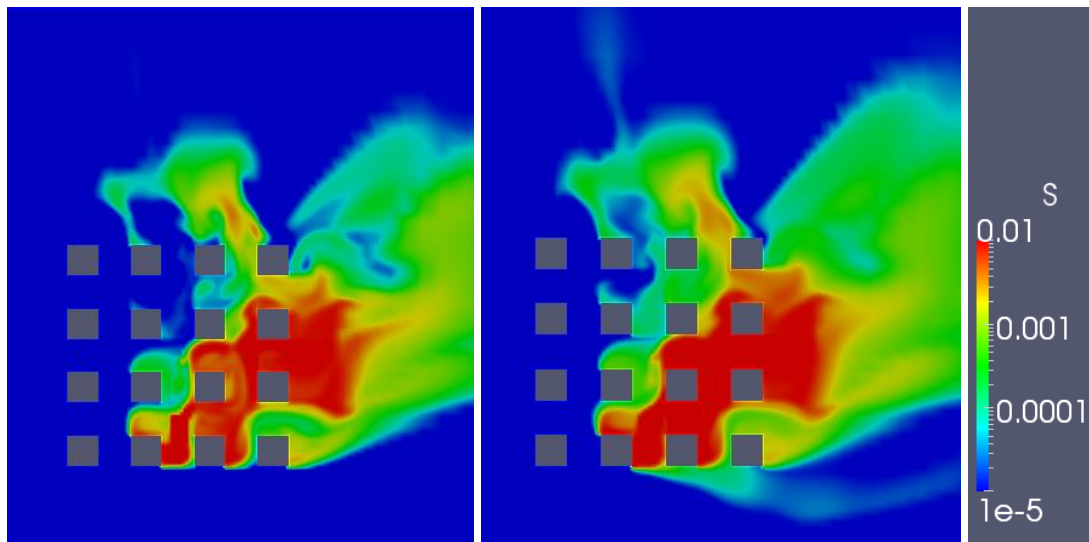


Figura 5.10. Campo de concentraciones  $S \in [0,0001 - 0,01]$ , difusión de un gas de difusividad  $D=10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$  (izquierda) y  $10^{-1} \text{ m}^2/\text{s}$  (derecha), en  $t=600\text{s}$

Como puede observarse en la Figura 5.9, la forma del penacho que se forma en ambos casos es muy similar, con la única diferencia de que, en el caso de difusividad mayor, la “burbujas” que se forman cuando la difusividad es menor se encuentran unidas y no aisladas. Esto aparece a la izquierda de la zona de edificios en la Figura 5.9.

En cuanto al perfil de concentraciones a nivel del suelo, en ambos casos es prácticamente idéntico, salvo por la tendencia de invadir con algo más de intensidad pequeñas zonas interiores en los cruces de calles.

Teniendo en cuenta que la diferencia de difusividad entre ambos ensayos es de 6 órdenes de magnitud, muy lejos en ambas direcciones de los valores típicos de gases reales, se concluye que el efecto de éste parámetro no es elevado, y se considerará el mismo valor en las sucesivas simulaciones que se realicen en los siguientes puntos.

## 5.4 Estudio del efecto de la densidad

A continuación se presentan los resultados obtenidos en las simulaciones destinadas al estudio de la influencia de la densidad del contaminante, que corresponde al análisis de la forma del penacho. En el *Anexo v* pueden verse estos resultados junto con otros correspondientes al campo de concentraciones a nivel del suelo. Los gases considerados en este estudio son el helio, de densidad  $\rho = 0,1785 \text{ kg/m}^3$ , y el hexafluoruro de azufre, con  $\rho = 6,164 \text{ kg/m}^3$ .

Las Figuras 5.11 a 5.13 muestran imágenes correspondientes a instantes tomados con un periodo de **1 minuto**, vistos de izquierda a derecha y de arriba abajo.

En el caso de la evolución del penacho, se ha considerado, arbitrariamente, un nivel de concentración de  $S = 0,0001$ , y se ha seguido la evolución de la superficie correspondiente a ese valor, en cuyo interior se encontrarán las zonas con concentraciones mayores a dicho nivel. Los colores del penacho representado se refieren a la velocidad del flujo en cada zona determinada.

En cuanto al campo de concentraciones a nivel del suelo, se han seguido los niveles de concentración correspondientes a  $S = 0,5$ ,  $S = 0,1$ ,  $S = 0,01$ ,  $S = 0,001$ ,  $S = 0,0001$  y  $S = 0,00001$ , representados en la escala de colores.



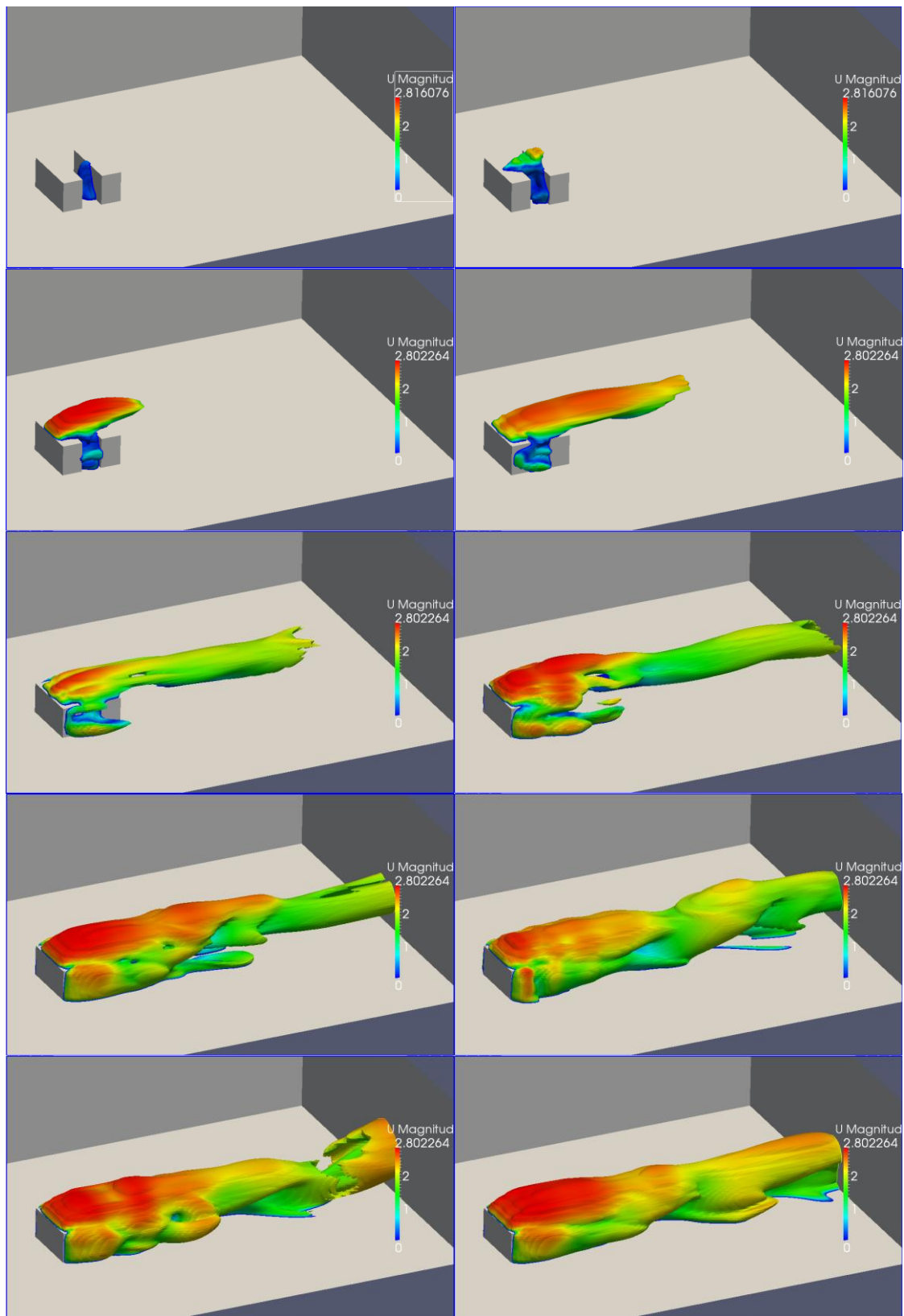


Figura 5.11. Instantáneas del penacho a intervalos de 1 minuto. Helio a 1m/s

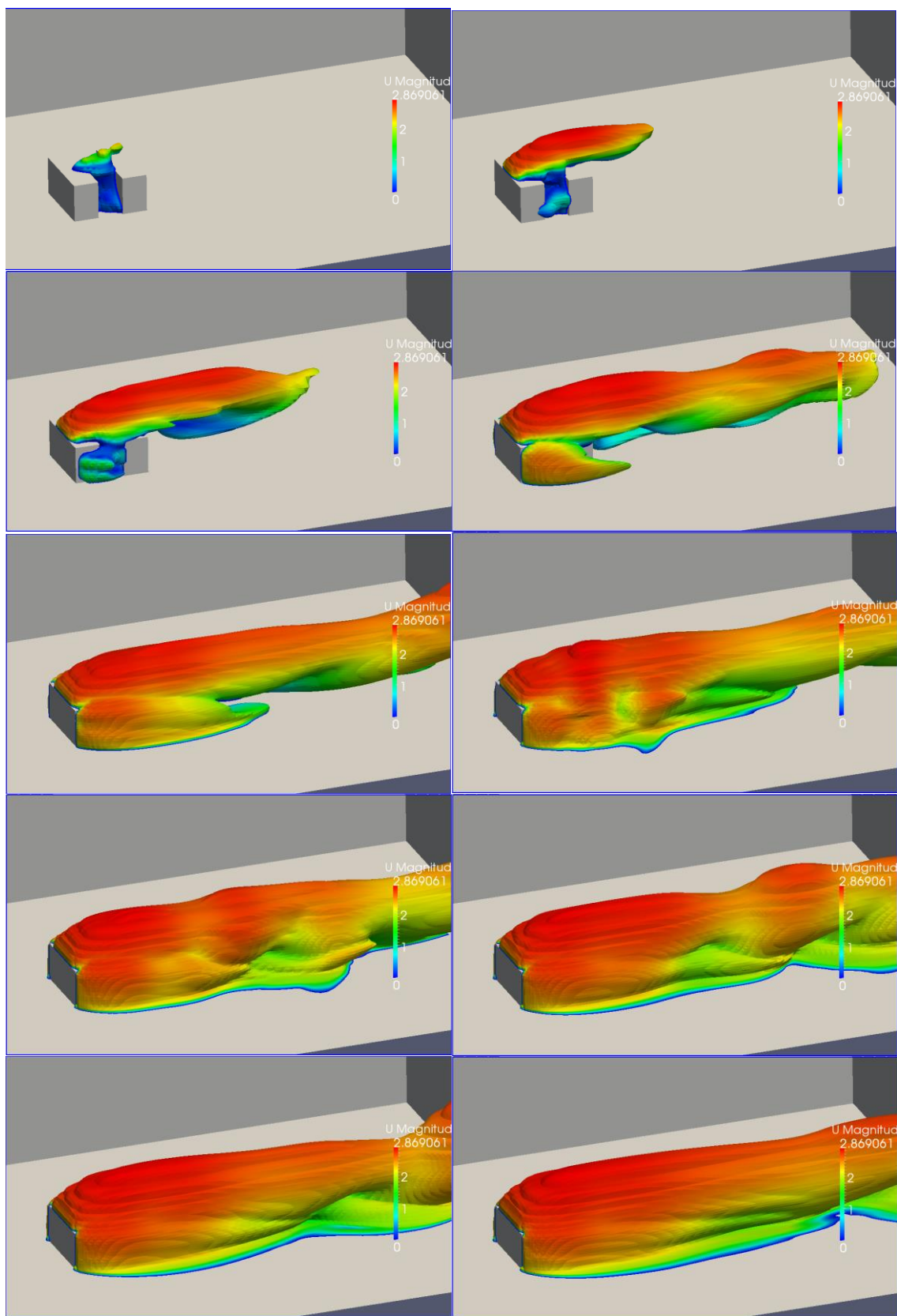


Figura 5.12. Hexafluoruro de azufre a 1 m/s

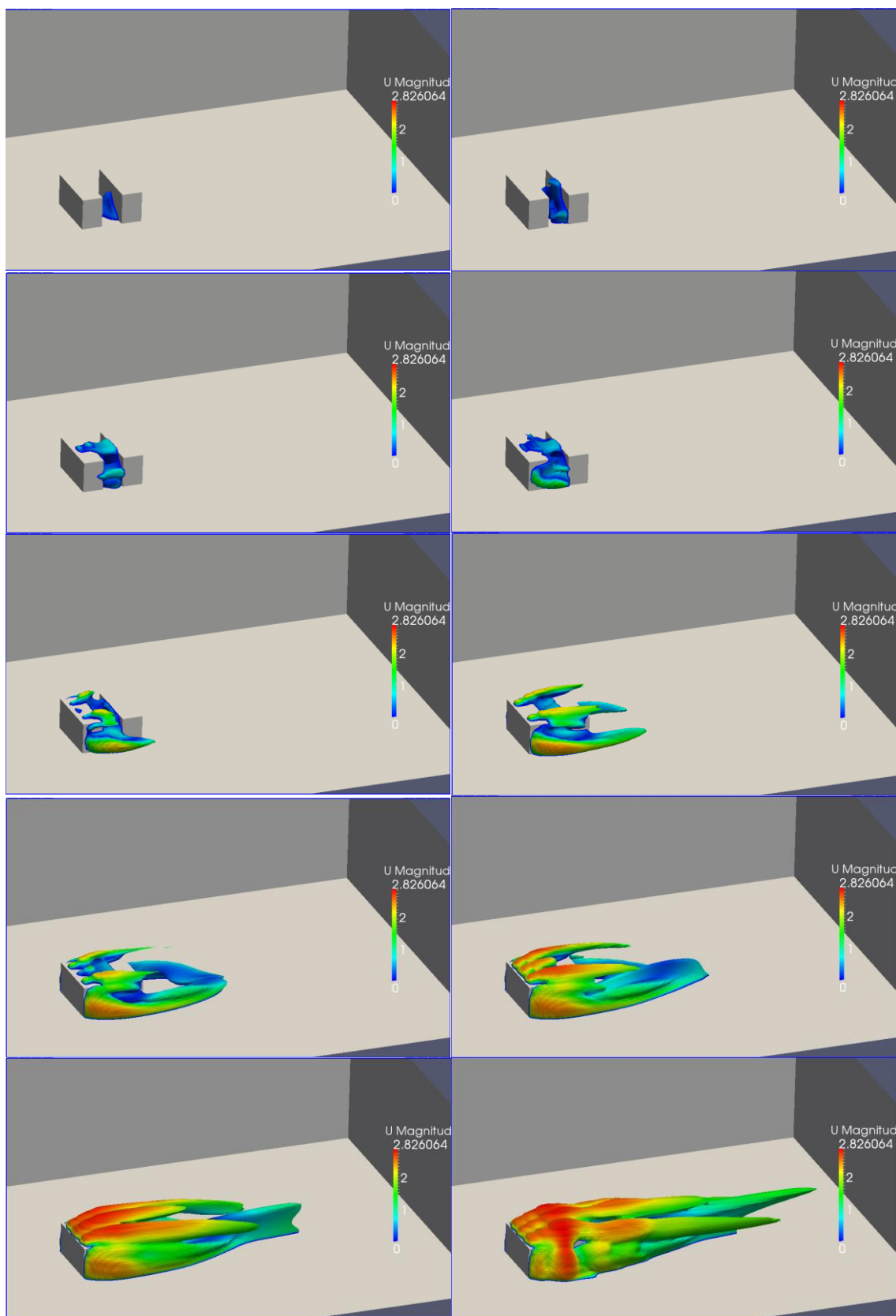


Figura 5.13. Hexafluoruro de azufre a 0,0289 m/s

Analizando las Figuras 5.11 a 5.13, se puede concluir lo siguiente:

Si comparamos el comportamiento de dos gases de densidades muy diferentes en un escape a la misma velocidad de salida (helio y hexafluoruro de azufre a 1 m/s, Figuras 5.11 y 5.12), el gas ligero tarda más tiempo en salir de la zona de la emisión y salir al flujo principal, por lo que el gas pesado, en el mismo tiempo, se ha extendido mucho más. Esto se debe a que el chorro de gas ligero emitido, al tener una densidad menor (34 veces menor en este caso), tiene menor cantidad de movimiento, que se ve superada por la cantidad de movimiento del flujo principal de viento, dificultándose su salida al exterior.

Es por esto que también se han comparado dos emisiones de gases de distinta densidad pero con la misma cantidad de movimiento en su salida. Se observa entonces que la mayor densidad del hexafluoruro de azufre le hace tener una menor flotabilidad y una mayor resistencia a la propagación. Esto se observa comparando las Figuras 5.11 y 5.13, donde se puede ver que el hexafluoruro de azufre sale al flujo principal por los laterales de los edificios en lugar de por la parte superior, como sí ocurre en el caso del helio, además de tardar mucho más tiempo en hacerlo y de ser arrastrado a menor velocidad posteriormente.

## 5.5 Ejemplo de caso real: Edificio Torres Quevedo

El caso que se plantea es la emisión accidental durante 2 segundos de un gas desde la parte posterior del edificio, seguida de un seguimiento de su disipación durante un tiempo de 10 minutos.

Se han realizado las siguientes simulaciones,

Origen del viento	O-NO	NO	N-NO	SE
Velocidad	20 km/h			5 km/h
	25 km/h			
	30 km/h			
	35 km/h			10 km/h
	40 km/h			

### 1) Evolución del campo de concentraciones

Como ejemplo de la evolución de la localización de las zonas peligrosas tras una emisión, las siguientes figuras muestran los resultados del campo de concentraciones a nivel del suelo para una velocidad de 30 km/h, con viento del noroeste (NO), a intervalos de 30 segundos. En el *Anexo V: Resultados*, se pueden consultar los resultados de los demás casos.

Se ha considerado un valor de referencia para la concentración de  $S = 0,00001$ , que se asemejaría a los niveles típicos de varios miligramos de contaminante por metro cúbico de aire que se estiman como umbrales de peligro para la salud humana en cuanto a concentración de emisiones peligrosas.

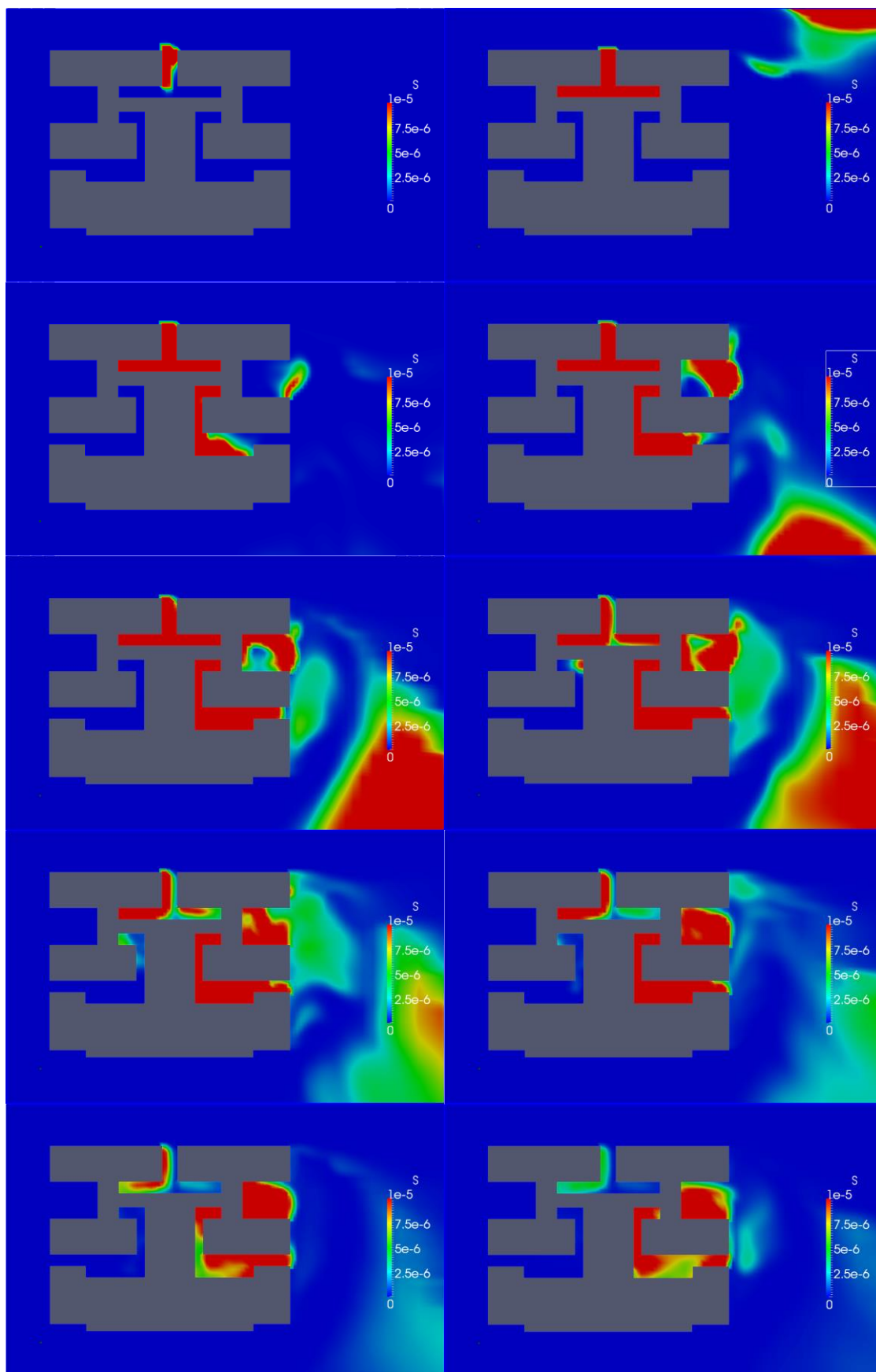


Figura 5.17a. Evolución del campo de concentraciones tras una emisión en el *edificio Torres Quevedo*

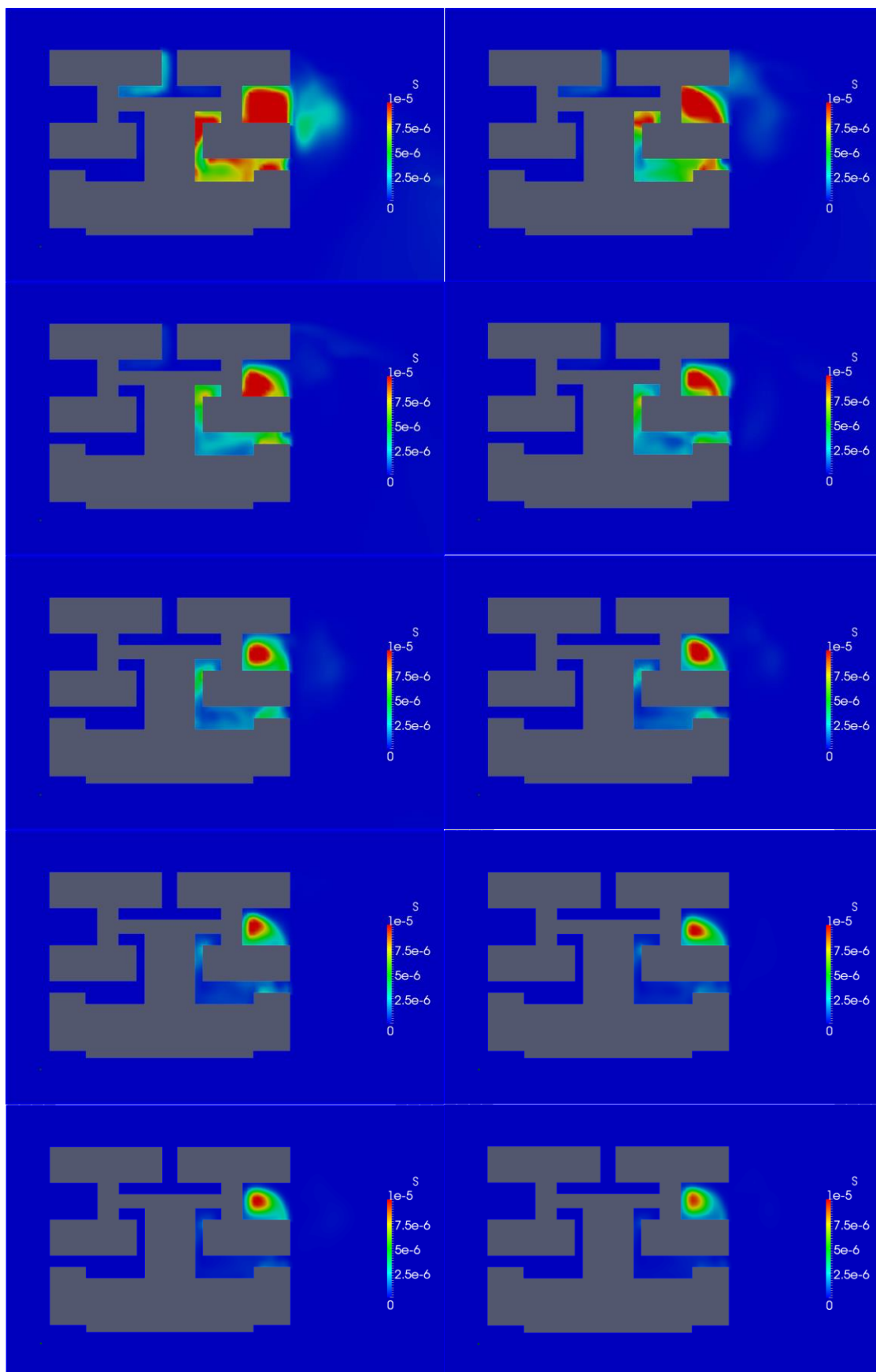


Figura 5.17b. Evolución del campo de concentraciones tras una emisión en el *edificio Torres Quevedo*

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

La observación del campo de concentraciones puede resultar útil en ciertos casos, pero el uso de escalas de color puede no ser lo suficientemente preciso en otros. Es por eso que se muestran también las gráficas de la evolución de la concentración en puntos concretos del escenario, mediante las cuales se puede seguir con una mayor exactitud cuándo se ha sobrepasado el umbral fijado como peligroso.

En este apartado se presentan los resultados (Figuras 5.19 a 5.22) de uno de los casos como ejemplo. En concreto, el correspondiente a una velocidad de 30 km/h, con viento del noroeste (NO). En el *Anexo V: Resultados* se pueden consultar los resultados obtenidos en todas las simulaciones.

Los puntos donde se ha realizado el sondeo en el tiempo son los siguientes (ver Figura 5.18):

- Las dos entradas principales del edificio (1 y 2)
- Las cuatro salidas a los patios interiores (3 al 6)
- Las dos salidas de emergencia en la fachada principal del edificio (7 y 8)
- El lugar de la emisión, detrás del edificio (9)

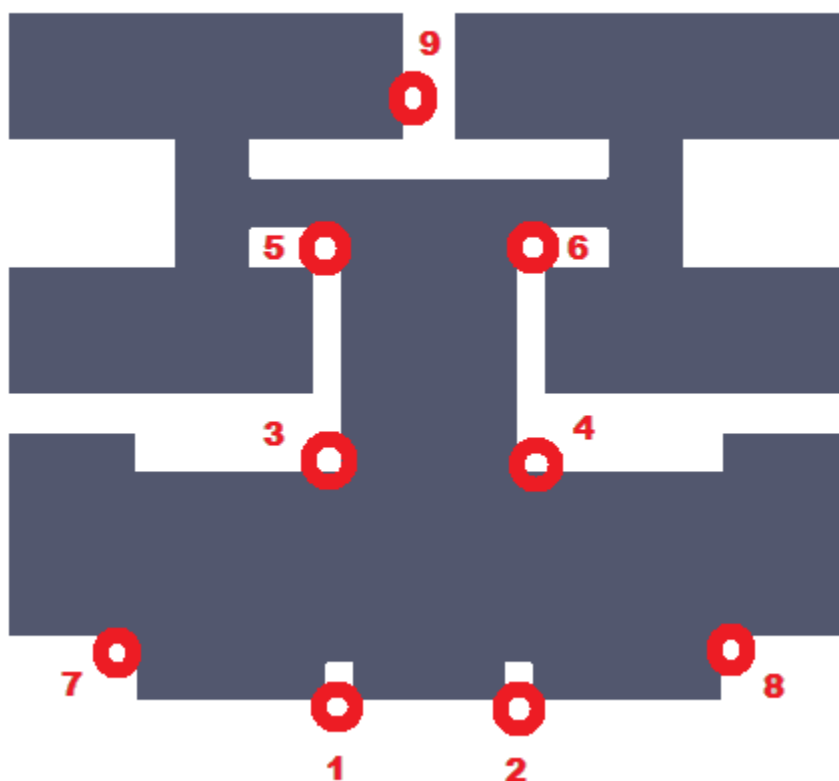


Figura 5.18. Puntos de sondeo en el *edificio Torres Quevedo*

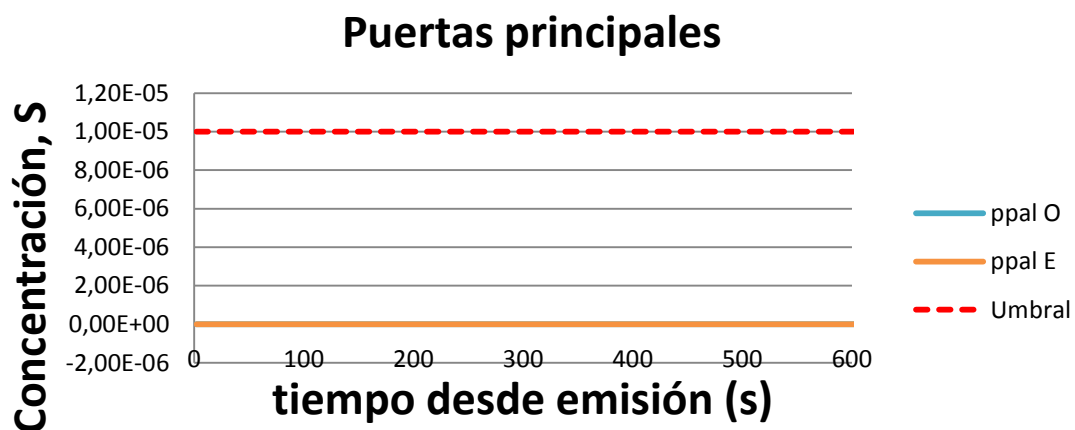


Figura 5.19. Evolución de la concentración en las puertas principales

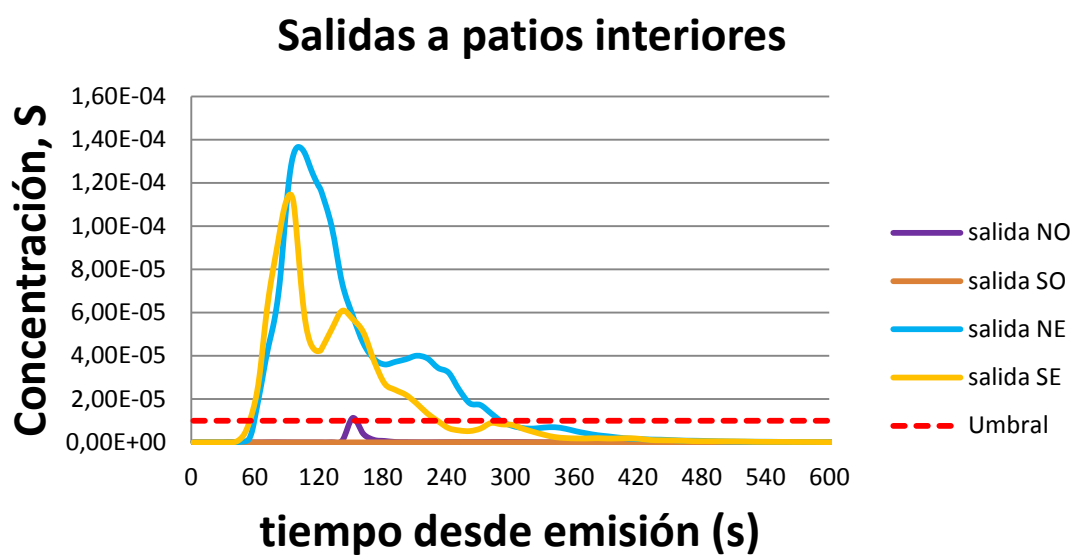


Figura 5.20. Evolución de la concentración en las salidas interiores



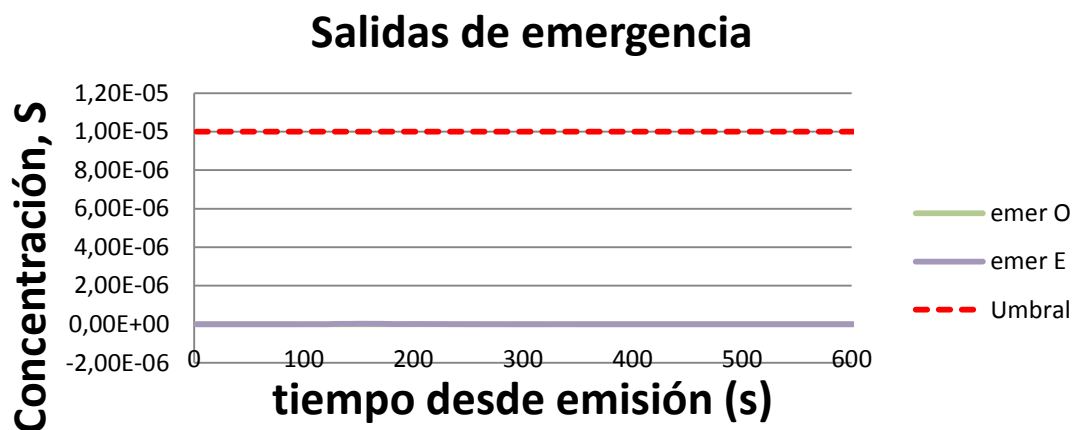


Figura 5.21. Evolución de la concentración en las salidas de emergencia

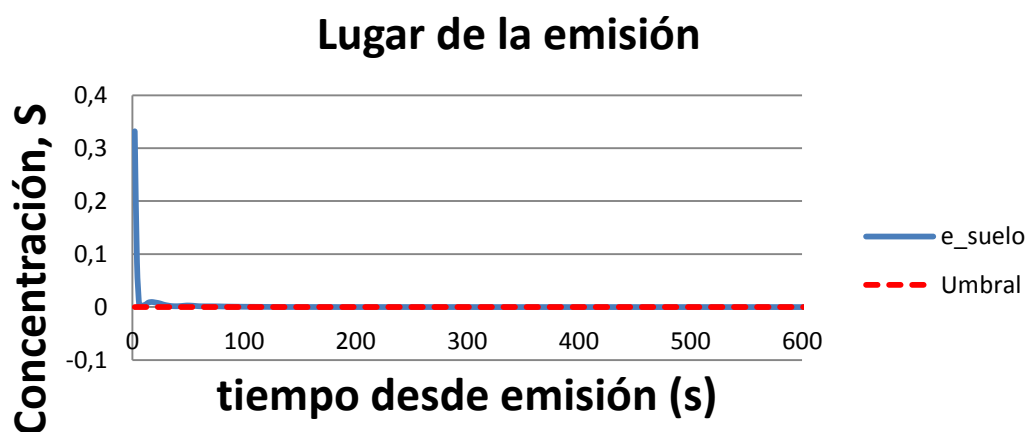


Figura 5.22. Evolución de la concentración en las salidas de emergencia

Analizando los resultados de todos los casos para distintas direcciones y velocidades de viento, éstos se pueden resumir de la siguiente manera.

La figura 5.23 muestra el tiempo que tarda la zona donde se ha producido la emisión en bajar de un nivel de concentración considerado peligroso, de manera que a partir de ese tiempo sería seguro acceder al lugar.

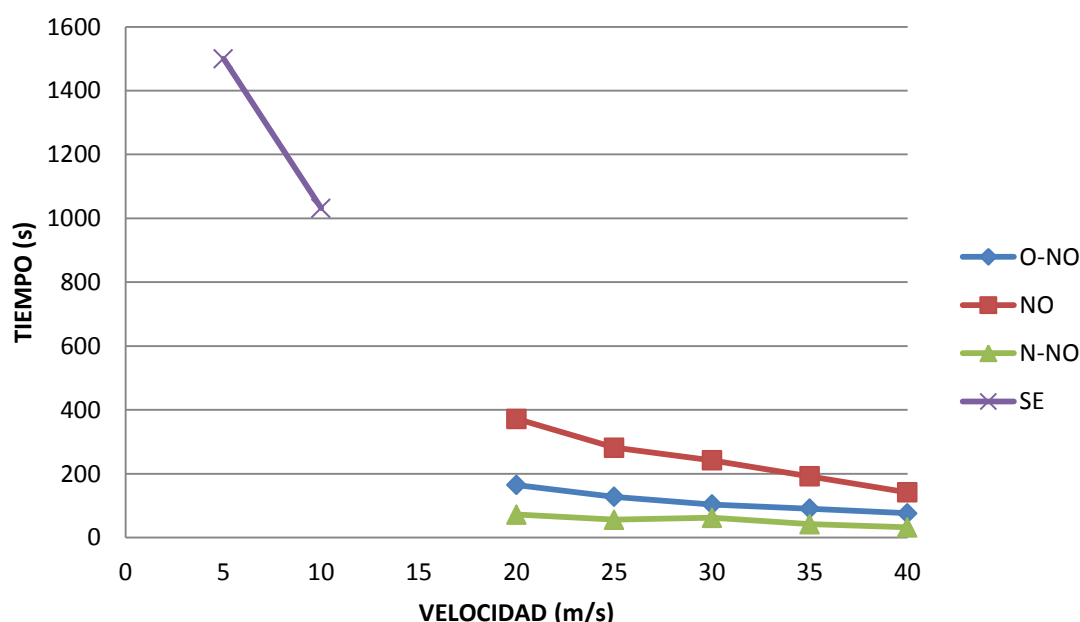


Figura 5.23. Tiempo de dispersión según dirección y velocidad del viento

Otro análisis que se puede realizar es el de la seguridad de las distintas zonas de acceso que tiene el edificio, que podría utilizarse para trazar rutas de evacuación según las condiciones del viento.

Como se ve en la Figura 5.23, en casos de bochorno la dispersión sería mucho más lenta que en casos de cierzo.

En la Figura 5.24 se muestra por qué accesos sería más segura una evacuación, mediante un código de colores. El color verde indica que en ningún momento la concentración en esa zona alcanza niveles siquiera cercanos a los peligrosos, el color naranja indica que en algún momento los niveles de concentración en ese punto pueden estar cercanos al umbral de peligro, o superarlo, durante un corto periodo de tiempo. Finalmente, el color rojo indica que los niveles de concentración en la zona son superiores al nivel crítico durante gran parte del tiempo.

Se puede concluir que la puerta principal oeste o la salida de emergencia del mismo lado son las mejores opciones, sea cual sea la condición del viento.

PATIO NO				
	O-NO	NO	N-NO	SE
5km/h				
10km/h				
20km/h				
25km/h				
30km/h				
35km/h				
40km/h				

PATIO NE				
	O-NO	NO	N-NO	SE
5km/h				
10km/h				
20km/h				
25km/h				
30km/h				
35km/h				
40km/h				

PATIO SO				
	O-NO	NO	N-NO	SE
5km/h				
10km/h				
20km/h				
25km/h				
30km/h				
35km/h				
40km/h				

PATIO SE				
	O-NO	NO	N-NO	SE
5km/h				
10km/h				
20km/h				
25km/h				
30km/h				
35km/h				
40km/h				

PRINCIPAL O				
	O-NO	NO	N-NO	SE
5km/h				
10km/h				
20km/h				
25km/h				
30km/h				
35km/h				
40km/h				

PRINCIPAL E				
	O-NO	NO	N-NO	SE
5km/h				
10km/h				
20km/h				
25km/h				
30km/h				
35km/h				
40km/h				

EMERGENCIA O				
	O-NO	NO	N-NO	SE
5km/h				
10km/h				
20km/h				
25km/h				
30km/h				
35km/h				
40km/h				

EMERGENCIA E				
	O-NO	NO	N-NO	SE
5km/h				
10km/h				
20km/h				
25km/h				
30km/h				
35km/h				
40km/h				

Figura 5.24. Seguridad de los accesos al edificio según condiciones de viento

## Capítulo 6

### 6 Conclusiones

En este último capítulo es imprescindible realizar una valoración de los resultados finales, así como de todo el trabajo desarrollado en este proyecto.

El capítulo anterior demuestra las posibilidades del análisis CFD como herramienta de predicción de la dispersión de contaminantes en medios urbanos, pudiendo determinar la influencia de distintos parámetros en la propagación de los gases, lo que permite tener en cuenta multitud de posibilidades que permitan la representación de casos reales. Si bien los resultados deben tomarse con cautela, se puede decir que la valoración final del análisis llevado a cabo en este proyecto es positiva.

La dificultad a la hora de ajustar el modelo, que aunque resulta acertado el orden de magnitud de los resultados, no lo es tanto en cuanto a ciertos perfiles de concentración, junto con la posibilidad de mejorarlo con el fin de simular comportamientos más complejos de contaminantes, hacen que se valore la posibilidad de que el procedimiento de análisis desarrollado aquí sirva como base para futuros trabajos.

Cabe mencionar también que se han cumplido los objetivos fijados al principio del proyecto.

# BIBLIOGRAFÍA

## 7 Bibliografía

1. *Experimental study on flow and gaseous diffusion behind an isolated building*. **Yassin, M.F., Ohba, M. y Tanaka, H.** 2008, *Environ Monit Assess*, págs. 147:149-158.
2. **De Vaull, G. E.** *Understanding Atmospheric Dispersion of Accidental Releases*. 1995.
3. **Tominaga, Y. y Stathopoulos, T.** CFD simulation of near-field pollutant dispersion in the urban environment: A review of current modeling techniques. *Atmospheric Environment*. 2013.
4. **Raupach, M. R.** Conditional statistics of reynolds stress in rough-wall and smooth-wall turbulent boundary layers. *Journal of Fluid Mechanics*. 1981.
5. **Rotach, M. W.** Turbulence close to a rough urban surface part i: Reynolds stress. *Boundary-Layer Meteorology*. 1993.
6. **Cheng, H. y Castro, I.P.** Near wall flow over urban-like roughness. *Boundary-Layer Meteorology*. 2002.
7. **Britter y Hanna.** *Flow layers over an urban environment*. 2003.
8. **Monin, A. S. y Obukhov, A. M.** Basic Laws of Turbulent Mixing in the Atmosphere Near the Ground. 1954.
9. **Jackson, P. S.** On the displacement height in the logarithmic velocity profile. *Journal of Fluid Mechanics*. 1981.
10. **Belcher, E.** Mixing and transport in urban areas. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2005.
11. **Oke, T.R.** Street design and urban canopy layer climate. *Energy and Buildings*. 1988.
12. **McCormick, R. A. y Scorer, R. S.** Air pollution in the locality of buildings [and discussion]. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. 1971.
13. **Taylor, G. I.** Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the London Mathematical Society*. 1922.
14. **Hirsch, C.** *Numerical computation of internal and external flows, Vol. 1*. 1988.
15. **Ferziger, J. H. y Peric, M.** *Computational Methods for Fluid Dynamics*. s.l. : Springer, 2002.
16. CFD Online Discussion Forums. <http://www.cfd-online.com/Forums>. [En línea]



# ANEXO I: Conceptos Previos

Este capítulo sirve como explicación de los principios básicos de la teoría de fluidos que definen el movimiento del aire y el de un contaminante dentro de un flujo.

El primer apartado explica las hipótesis sobre las que se basa toda la teoría de la mecánica de fluidos explicada después.

El segundo apartado trata sobre la obtención de las ecuaciones que definen el comportamiento de los fluidos, a las que en su conjunto se les denomina *ecuaciones de Navier-Stokes*. Por otra parte, la necesidad de ecuaciones adicionales para completar el modelo matemático se explica en el tercer apartado.

El cuarto apartado está dedicado al modelizado del contaminante que viajará dentro del fluido, y a la manera en la que éste influye en el resto modelo numérico.

Finalmente, en el quinto y último apartado se describe cómo se tiene en cuenta el comportamiento turbulento del fluido.

## 1 Qué es un fluido. Realidad e idealización

Un fluido es un **medio continuo**, es decir, un agregado que se mueve (se deforma) en forma continua al transcurrir el tiempo,  $t$ , y forma un todo continuo en el espacio  $\mathbf{x} = (x, y, z)$ . Tal medio se trata como compuesto de partículas puntuales. No hay en ello ninguna objeción de tipo matemático; en los últimos siglos las matemáticas se han inclinado frecuentemente por el estudio de magnitudes continuas frente a las discretas, y en tal hipótesis se basan la geometría diferencial, las ecuaciones diferenciales y una gran parte de los procesos estocásticos. Aunque no el cálculo numérico, evidentemente.

Ahora bien, la mecánica es una ciencia física que pretende describir el comportamiento de los cuerpos (sólidos, líquidos, gases o plasmas) y apoya por tanto su formulación matemática en la *experiencia* y la *teoría*. A este respecto, el concepto de medio continuo es una abstracción que, estrictamente hablando, está en contra de una teoría incontestable y ampliamente verificada, la teoría atómica, que describe la realidad a escala inferior al nanómetro ( $10^{-9}$  m; por ejemplo, el radio del átomo más pequeño, el de hidrógeno, mide alrededor de medio angström,  $0,5 \cdot 10^{-10}$  m). Un matemático a la usanza clásica tiene tendencia a resolver tal situación rechazando de plano al candidato que tropieza con una tal contradicción. Pues bien, la teoría de los fluidos no acepta tal rechazo. Se trata por el contrario de construir una teoría matemática que sirva de *modelo* a una parcela de la *realidad*; un modelo renuncia a la categórica exactitud y ha de ser juzgado por una parte desde el punto de vista *matemático*, en que se tiene en cuenta la belleza, extensión y profundidad de las matemáticas originadas; y por otra parte desde el punto de vista *físico*, por su eficacia en reflejar y en permitirnos *intuir* y

conocer la realidad subyacente, *explicar* su funcionamiento observado y *predecir* su evolución futura. Hoy día, en el período dorado de la ciencia *computacional*, debería añadirse como esencial la capacidad de *calcular* y *controlar* eficazmente en base a este modelo.

La aproximación del medio continuo resulta ser tan efectiva que se olvida con frecuencia de que se trata de un modelo. Es con todo importante tener en cuenta las hipótesis de partida. Así, la consideración del fluido como un medio continuo se basa en que éste consiste en un agregado de partículas en movimiento caótico y que la distancia característica de este movimiento, que recibe el nombre técnico de “recorrido libre medio entre colisiones”,  $\lambda$ , es mucho menor que las longitudes experimentales, que tomamos típicamente como mayores de  $10^{-5}$  cm, de forma que sólo percibimos un cierto promedio de los procesos individuales entre partículas. Ahora bien, en ciertos casos (como, por ejemplo, en los gases enrarecidos de la materia interestelar) el recorrido libre medio puede ser mucho mayor, la hipótesis del continuo cesa de ser válida y no quedará más remedio que recurrir a teorías “más detalladas” que tengan en cuenta los movimientos moleculares (como la teoría cinética de gases). Precisamente, una de las líneas más activas de la investigación matemática actual es la obtención de las leyes del medio continuo como límite de las teorías cinéticas.

Una vez establecido que se trabaja en escalas muy superiores al recorrido libre medio de las partículas se puede olvidar el fino detalle de su movimiento individual y ver en torno a cada punto del espacio  $\mathbf{x}$  y para cada instante  $t$  un *volumen elemental representativo*,  $\delta V$ , de tamaño *mesoscópico*, es decir, mucho mayor que  $\lambda$  y mucho menor que las longitudes macroscópicas en las que se va a trabajar. Este volumen elemental, que se denomina también *partícula fluida*, es considerado como un medio continuo y homogéneo; en él se define una velocidad media del movimiento de ese elemento, que será la *velocidad* puntual en este punto e instante,  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ . Dicho en forma más matemática, se admite que existe un valor límite de los promedios cuando  $\delta V$  se hace muy pequeño en la escala intermedia, es decir, es muy pequeño pero aún muy por encima de la escala atómica. Del mismo modo, se habla de las demás magnitudes macroscópicas, como la *densidad*, que es la masa por unidad de volumen en el sentido de límite mencionado, y la *presión*, que es la fuerza normal por unidad de área ejercida por el fluido sobre una superficie ideal inmersa en él o rodeándolo. Esta magnitud tiene una evidente explicación física, por ejemplo en un gas encerrado en un recipiente, como el efecto neto de las colisiones de las partículas individuales reales sobre la superficie de las paredes. A estas tres magnitudes básicas se unirán otras en el curso del estudio, como temperatura, *energía interna*, *entropía*, *viscosidad*,... según el modelo sea más o menos complejo. La existencia de estos valores medios para las magnitudes fundamentales en cada partícula fluida es lo que constituye la hipótesis de continuidad del medio.

## 2 Ecuaciones fundamentales de los fluidos

Una vez identificado el tema de estudio, con sus aproximaciones admitidas y las variables que describen el sistema, el modelizador ha de proceder a escribir las leyes que relacionan a esas variables y nos permitirán predecir el funcionamiento del sistema. Siguiendo a Newton, estas leyes son diferenciales. Al involucrar el espacio y el tiempo son ecuaciones en derivadas



parciales, EDPs. Siendo varias las variables que describen el sistema, se tratará de un sistema de ecuaciones. Además, las ecuaciones son no lineales. Se llega pues a un Sistema de Ecuaciones en Derivadas Parciales de Evolución No Lineales, que son uno de los temas en donde está la frontera del saber matemático en nuestros días, tres siglos después de Newton.

Las leyes fundamentales son las siguientes: ley de conservación de la masa y ley de conservación de la cantidad de movimiento, cuyo desarrollo se expone en los siguientes apartados.

### Supuestos básicos

Las ecuaciones de Navier-Stokes, como se ha mencionado anteriormente, se basan en el supuesto de que el fluido, a escalas de interés, se comporta como un medio continuo y no como un conjunto de partículas discretas. Otro supuesto necesario es que los campos de interés como la presión, velocidad, densidad y temperatura son al menos débilmente diferenciables.

Estas ecuaciones se derivan de los principios básicos de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía. Es por eso que a veces es necesario considerar un volumen finito arbitrario, llamado *volumen de control*, al cual se aplican estos principios. Este volumen finito se denota por  $\Omega$  y su frontera (superficie exterior) como  $\partial\Omega$ . El volumen de control puede estar fijo en el espacio o moverse con el fluido.

Cabe recalcar que, aunque se les suele llamar en su conjunto *ecuaciones de Navier-Stokes*, en realidad la *ecuación de Navier-Stokes* es una sola: la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento, que debe ir acompañada de la ecuación de conservación de la masa o *ecuación de continuidad*, y, en ocasiones, de la ecuación de conservación de la energía y de una ecuación de estado, como se verá más adelante.

### La derivada substancial

Los cambios de las propiedades de un fluido en movimiento pueden medirse de dos maneras diferentes. Por un lado, puede realizarse la medida en un punto fijo en el espacio mientras las partículas del fluido pasan por él, y por otro se puede seguir a una partícula fluida a lo largo de su línea de corriente y medir los cambios que sufre. La derivada de un campo respecto a una posición fija en el espacio se denomina *derivada Euleriana*, mientras que la derivada asociada al movimiento de una partícula se llama *derivada Lagrangiana*, también conocida como *advectiva* o *substancial*.

La derivada substancial se define mediante el siguiente operador:

$$\frac{D}{Dt} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \quad \text{Ec. I.1}$$

Donde  $\mathbf{u}$  es la velocidad del fluido. El primer término se corresponde con la derivada Euleriana (referida a una referencia fija), mientras que el segundo representa los cambios de una magnitud respecto a la posición (advección). Se trata de la derivada de una función de varias variables a lo largo de una trayectoria siguiendo el movimiento del fluido.

### Leyes de conservación

Las ecuaciones de Navier-Stokes son un caso especial de la ecuación general de continuidad que se obtienen a partir de los principios de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía.

Esto se realiza a partir del *teorema de transporte de Reynolds*, que establece que la suma de los cambios de una propiedad intensiva (llamada aquí  $L$ ) definida en un volumen de control  $\Omega$  fijo debe ser igual a lo que se pierde (o se gana) a través de las fronteras del volumen más lo que se genera o destruye en su interior por fuentes y sumideros. Esto se expresa mediante la siguiente ecuación integral:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} L dV = - \int_{\partial\Omega} L \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA - \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV \quad \text{Ec. I.2}$$

Donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad del fluido y  $Q$  representa las fuentes y sumideros dentro del fluido, tomando los sumideros como positivos.

En este punto, aplicando el *teorema de la divergencia* a la integral de superficie (denotada por  $\partial\Omega$ ), se transforma en una integral de volumen:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} L dV = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (L \mathbf{u}) dV - \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV \quad \text{Ec. I.3}$$

Aplicando la *regla de Leibniz* a la integral de la izquierda y combinando todas las integrales se obtiene:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial L}{\partial t} dV = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (L \mathbf{u}) dV - \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV \quad \Rightarrow \quad \int_{\Omega} \left( \frac{\partial L}{\partial t} + \nabla \cdot (L \mathbf{u}) + \mathbf{Q} \right) dV = 0 \quad \text{Ec. I.4}$$

La integral debe ser igual a cero para **cualquier** volumen de control, lo cual sólo se cumple si el integrando mismo es igual a cero, de manera que:

$$\frac{\partial L}{\partial t} + \nabla \cdot (L \mathbf{u}) + \mathbf{Q} = 0 \quad \text{Ec. I.5}$$

Esta relación obtenida es una ecuación de continuidad muy genérica, y es válida también cuando  $L$  es una variable vectorial. A partir de ella, planteando la conservación de cantidad de movimiento, de masa y de energía, se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes que servirán para describir el comportamiento de un fluido.

## 2.1 Conservación de la cantidad de movimiento

La más elemental de las ecuaciones de Navier-Stokes se obtiene al aplicar la relación de conservación a la cantidad de movimiento  $\rho \mathbf{v}$ , de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \mathbf{Q} = 0 \quad \text{Ec. I.6}$$

El conjunto de fuerzas de volumen (escrito como  $\mathbf{Q} = \mathbf{b}$ ) es una fuente o sumidero de cantidad de movimiento por unidad de volumen. Expandiendo las derivadas por completo resulta:

$$\mathbf{u} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} = \mathbf{b} \quad \text{Ec. I.6}$$

Tras reordenar los términos, se obtiene:

$$\mathbf{u} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \mathbf{b} \quad \text{Ec. I.8}$$

Teniendo en cuenta que  $\mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot (\rho \mathbf{u})$ , se obtiene:

$$\mathbf{u} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) + \rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \mathbf{b} \quad \text{Ec. I.9}$$

La expresión entre paréntesis de la izquierda es, como se verá a continuación, la *ecuación de continuidad* y, por lo tanto, es igual a cero. A su vez, la expresión entre paréntesis de la derecha se corresponde con la *derivada substancial* de la velocidad. De manera que teniendo en cuenta esto, la ecuación se reescribe como:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \mathbf{b} \quad \Rightarrow \quad \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \mathbf{b} \quad \text{Ec. I.10}$$

La relación que resulta es equivalente a la expresión de la *segunda ley de Newton* ( $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ ) en términos de fuerzas de volumen en lugar de fuerzas puntuales.

## 2.2 Conservación de la masa

Generalmente, es necesario también plantear la conservación de la masa. Tomando  $\mathbf{Q} = 0$ , es decir, eliminando cualquier fuente o sumidero de masa, e incluyendo la densidad, la relación resultante es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \text{Ec. I.11}$$

Donde  $\rho$  es la densidad, y  $\mathbf{v}$  es la velocidad del fluido. Esta ecuación se denomina ecuación de continuidad de masa, o simplemente “la” ecuación de continuidad, y acompaña generalmente a la ecuación de Navier-Stokes.

En notación expandida o indicial, la ecuación se expresa como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad \text{Ec. I.12}$$

Donde se ha adoptado la convención de Einstein, según la cual cuando el mismo índice aparece dos veces en cualquier término, éste se refiere al sumatorio a lo largo del rango de dicho índice.

Donde  $x_i$  ( $i = 1,2,3$ ) o  $(x,y,z)$  son las coordenadas cartesianas y  $u_i$  o  $(u,v,w)$  son los componentes cartesianos del vector velocidad  $\mathbf{u}$ .

En el caso de un fluido incompresible,  $\rho$  es constante y la ecuación se reduce a:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{Ec. I.13}$$

Lo cual establece en realidad la conservación del volumen.

## 2.3 Forma general de las ecuaciones de movimiento (Caracterización de la ecuación de Navier-Stokes)

Partiendo de la *Ley de conservación de la cantidad de movimiento* obtenida anteriormente:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \mathbf{b} \quad \Rightarrow \quad \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \mathbf{b} \quad \text{Ec. I.14}$$

Es necesario definir el término  $\mathbf{b}$ , lo cual comienza al identificar las dos componentes que lo forman: una que describe las fuerzas generadas por las tensiones superficiales, y otra que engloba otras fuerzas generadas en todo el volumen, como la fuerza de la gravedad.

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \mathbf{b} = \mathbf{f}_{sup} + \mathbf{f}_{vol} \quad \text{Ec. I.15}$$

### Fuerzas superficiales

La gran particularidad de los fluidos reside en la fuerza de contacto en su superficie,  $\mathbf{f}_{sup}$  :

$$\mathbf{f}_{sup} = \mathbf{f}_p + \mathbf{f}_v \quad \text{Ec. I.16}$$

Identificar sus componentes llevó siglo y medio y en la tarea participaron Johann y Daniel Bernoulli y L. Euler que describieron la componente de presión como

$$\mathbf{f}_p = -\nabla p. \quad \text{Ec. I.17}$$

Digno de mención es Augustin Cauchy que añadió el análisis del concepto de tensor de esfuerzos como forma general del efecto de contacto, en 1822. En los decenios que siguen

varios prominentes científicos identificaron el efecto que debe añadirse al gradiente de presión para obtener el conjunto de fuerzas de contacto. Entre ellos la posteridad ha seleccionado los nombres de Claude-Louis Navier que propuso en 1822 la fórmula del efecto viscoso, y sir George Gabriel Stokes, que culminó en 1845 la modelización con una deducción racional y matemáticamente elegante, al uso actual. Según estos autores, en los fluidos usuales, llamados newtonianos, el esfuerzo de contacto (excluyendo la componente de presión) toma la forma de una fuerza viscosa, de la forma

$$\mathbf{f}_v = \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \lambda \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad \text{Ec. I.18}$$

Lo cual se obtiene tras plantear el tensor de tensiones e introducirlo en la ecuación, lo cual se explica a continuación.

\*\*\*

Se comienza examinando las tensiones que actúan sobre las caras del elemento fluido de la figura:

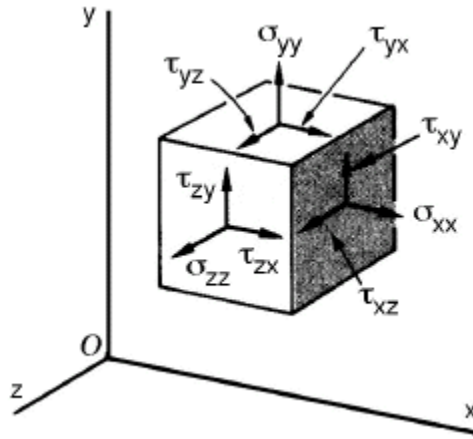


Fig. I.1. Tensiones sobre un elemento fluido

Estas tensiones pueden expresarse en forma de tensor, de manera que:

$$\mathbf{f}_{sup} = \nabla \cdot \bar{\sigma} \quad \text{Ec. I.19}$$

Por lo que

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \bar{\sigma} + \mathbf{f}_{vol} \quad \text{Ec. I.20}$$

Donde  $\bar{\sigma}$  se define como el *tensor de tensiones de Cauchy*, y  $\mathbf{f}_{vol}$  representa a otras fuerzas volúmicas presentes. Esta ecuación se denomina *ecuación de cantidad de movimiento de Cauchy* y describe la conservación no relativista de la cantidad de movimiento de cualquier medio continuo que conserve masa.

Debido a que se toma la divergencia del tensor, es obligatorio escribir la ecuación completamente simplificada, para que la apariencia original del tensor se pierda. Sin embargo, el tensor de esfuerzos tiene todavía otros usos importantes, especialmente en la formulación de condiciones de contorno en interfaces de fluidos.

El tensor  $\bar{\sigma}$  es simétrico de grado 2 y se define a partir de sus componentes covariantes:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Donde los términos  $\sigma$  son tensiones normales y los términos  $\tau$  son tensiones tangenciales.

Las fuerzas generadas en la superficie del elemento fluido serán causadas por las tensiones debidas a la presión, por un lado, y por las debidas al comportamiento viscoso del fluido, por otro. De manera que este tensor se puede separar en dos términos:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{xx} + p & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} + p & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} + p \end{pmatrix}$$

O, lo que es lo mismo,

$$\bar{\sigma} = -p\bar{\mathbf{I}} + \bar{\tau} \quad \text{Ec. I.21}$$

Donde  $-p$  es la presión mecánica sufrida por la superficie del elemento fluido,  $\bar{\mathbf{I}}$  es la matriz identidad de rango 3x3 y  $\bar{\tau}$  es el llamado *tensor desviador de tensiones* (o *deviatorico*), responsable de las fuerzas superficiales debidas a la viscosidad.

El motivo de hacer esta separación es que la presión es una variable típica de interés, y también que esto simplifica la aplicación de la ecuación a familias específicas de fluidos, ya que el tensor  $\bar{\tau}$  debe ser nulo para un fluido en reposo.

De esta manera, la Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento siguiente

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \bar{\sigma} + \mathbf{f}_{vol} \quad \text{Ec. I.22}$$

Al realizar la siguiente sustitución

$$\bar{\sigma} = -p\bar{\mathbf{I}} + \bar{\tau} \quad \text{Ec. I.23}$$

queda reescrita en su forma más general como

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \mathbf{f}_{vol} \quad \text{Ec. I.24}$$

Esta ecuación es todavía incompleta. Para completarla, se deben tomar hipótesis sobre la forma que tienen  $\bar{\tau}$  y  $p$ , es decir, se necesitan las leyes constitutivas del tensor de tensiones, que puede obtenerse para familias de fluidos específicos, así como de la presión. Adicionalmente, si el fluido se considera compresible, será requerida una ecuación de estado,

que probablemente necesitará a su vez de la formulación de la ecuación de conservación de la energía.

Para determinar la forma de  $\bar{\tau}$ , es necesario hallar la relación entre las tensiones superficiales, tanto normales como cortantes (tangenciales), debidas al comportamiento viscoso del fluido, y la viscosidad misma del fluido. El resultado es diferente para distintas familias de fluidos. En este proyecto se verá únicamente el tratamiento para fluidos newtonianos.

### Fuerzas de volumen

Estas fuerzas actúan sobre todo el dominio fluido al mismo tiempo, no sólo en su superficie, y son debidas a campos externos como el gravitatorio y los campos electromagnéticos. También pueden ser fuerzas inducidas por movimientos de rotación (fuerza centrífuga y de Coriolis).

A partir de este punto, la gravedad será considerada como la única fuerza de volumen:

$$\mathbf{f}_{vol} = \rho \mathbf{g} \quad \text{Ec. I.25}$$

De manera que la ecuación general de Navier-Stokes queda como

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad \text{Ec. I.26}$$

## 2.4 Aplicación a fluidos newtonianos

La forma general de la ecuación de movimiento no puede usarse todavía, pues el tensor de tensiones es desconocido. La información necesaria corresponde normalmente con el comportamiento viscoso del fluido en cuestión. En el caso de este proyecto, los fluidos de interés son gases (aire y gases contaminantes), por lo que se obtendrá la forma de la ecuación aplicada a fluidos newtonianos.

La formulación para fluidos newtonianos se basa en la propiedad que los define, que es que los esfuerzos producidos en el flujo viscoso son proporcionales a su velocidad de deformación:

$$\tau_{ij} = \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

Donde:

- $\tau_{ij}$  es la tensión tangencial ejercida en un punto del fluido o sobre una superficie sólida en contacto con el mismo, y se puede considerar **constante**, tiene unidades de tensión o presión ([Pa]).
- $\mu$  es la viscosidad del fluido, y para un fluido newtoniano depende sólo de la temperatura, se mide en [Pa·s].
- $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$  es el gradiente de velocidad perpendicular a la dirección al plano en el que se calcula la tensión tangencial, [s<sup>-1</sup>].

Para poder aplicar esto a la ecuación de Navier-Stokes, Stokes hizo tres supuestos:

- El tensor de tensiones es una función lineal con la velocidad de deformación
- El fluido es isotrópico
- Para un fluido en reposo,  $\nabla \cdot \bar{\tau}$  debe ser cero (para que dé como resultado la presión hidrostática)

Para hallar la relación entre las tensiones  $\tau_{ij}$  y la viscosidad, se considera el elemento fluido de la Figura I.2.

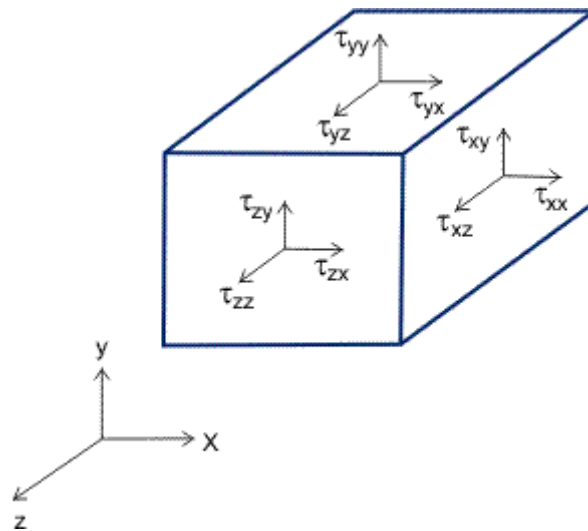


Fig. I.2. Tensiones deviatoricas en un elemento fluido

Donde cada cara del elemento fluido experimenta esfuerzos tanto normales como tangenciales,  $\tau_{ij}$ , componentes del *tensor deviatorico*, que sólo contempla las tensiones causadas por la viscosidad y no por la presión:

$$\tau_{ij} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix}$$

Se hallarán primero los componentes tangenciales y, después, los normales.

En primer lugar, la deformación del elemento fluido es causada por la tensión cortante (tangencial). Sin embargo, a diferencia de la mecánica de sólidos donde la tensión es proporcional a la deformación, en la mecánica de fluidos la tensión es proporcional a la velocidad de deformación. La velocidad de deformación correspondiente al plano  $xy$  es:

$$\epsilon_{xy} = \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \quad \text{Ec. I.27}$$

Volviendo a observar la Figura I.2, la deformación en el plano  $xy$  debe ser producida por ambas  $\tau_{xy}$  y  $\tau_{yx}$ . Además, asumiendo que los momentos en el elemento fluido son nulos, se



da que  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ . Por lo tanto, sabiendo que  $\tau_{xy} = \tau_{yx} \propto \varepsilon_{xy}$  y que la constante de proporcionalidad es la viscosidad  $\mu$ , se tiene:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad \text{Ec. I.28}$$

Y, de forma similar para los  $yz$  y  $zx$  se obtiene

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad \text{Ec. I.29}$$

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad \text{Ec. I.30}$$

En segundo lugar, las tensiones normales  $\tau_{xx}$ ,  $\tau_{yy}$  y  $\tau_{zz}$  mostradas en la Figura I.2 podrían a primera vista parecer extrañas. En un fluido en reposo, la única fuerza normal a una superficie es la debida a la presión. Sin embargo, si los gradientes de velocidad  $\partial u/\partial x$ ,  $\partial v/\partial y$  y  $\partial w/\partial z$  son muy grandes en las caras de un elemento fluido, puede haber fuerzas significativas inducidas por la viscosidad, además de las producidas por la presión. Estas tensiones normales actúan para comprimir o expandir el elemento fluido, cambiando así su volumen.

Por lo tanto, las tensiones normales tendrán una componente proporcional a la dilatación, y otra proporcional a la velocidad de deformación en dirección normal. Teniendo en cuenta que la velocidad de variación de volumen (dilatación) del elemento fluido se corresponde con la divergencia del vector velocidad ( $\nabla \cdot \mathbf{u}$ ), y que la constante de proporcionalidad es la llamada *segunda viscosidad*  $\lambda$  (relacionada con la *viscosidad volumétrica*), se tiene:

$$\tau_{xx} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad \text{Ec. I.31}$$

$$\tau_{yy} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \quad \text{Ec. I.32}$$

$$\tau_{zz} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \quad \text{Ec. I.33}$$

Por lo tanto, se puede expresar el *tensor deviatórico* de forma general como

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad \text{Ec. I.34}$$

Donde  $\delta_{ij}$  es la *delta de Kronecker* ( $\delta_{ij} = 1$  si  $i = j$  y  $\delta_{ij} = 0$  en los demás casos).

O expresado en notación vectorial:

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\bar{\mathbf{I}} \quad \text{Ec. I.35}$$

Donde  $T$  indica la matriz transpuesta.

El valor de  $\lambda$ , que produce un efecto viscoso asociado al cambio de volumen, es muy difícil de determinar, ni siquiera su signo se conoce con absoluta certeza. Incluso en flujos compresibles,

el término que comprende  $\lambda$  suele ser despreciable; sin embargo, puede resultar importante ocasionalmente hasta en flujos casi incompresibles, por lo que resulta un tema de controversia. Cuando no se considera nulo, la aproximación más usual es la llamada *hipótesis de Stokes*, donde  $3\lambda + 2\mu = 0$ , por lo que  $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ .

Así, el tensor deviatórico queda como

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \quad \text{Ec. I.36}$$

La sustitución directa de  $\tau_{ij}$  en la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} + \rho \mathbf{g} \quad \text{Ec. I.37}$$

Que en notación indicial es

$$\rho \left( \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ki}}{\partial x_k} + \rho g_i$$

producirá la ecuación de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos compresibles, que en los ejes  $x$ ,  $y$  y  $z$  resulta:

$$\begin{aligned} \rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \\ = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) + \rho g_x \end{aligned} \quad \text{Ec. I.38}$$

$$\begin{aligned} \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \\ = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right) + \rho g_y \end{aligned} \quad \text{Ec. I.39}$$

$$\begin{aligned} \rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \\ = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \rho g_z \end{aligned} \quad \text{Ec. I.40}$$

Tomando únicamente los términos viscosos, en el eje  $x$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial x} \left( 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) \\
 &= 2\mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial x} \\
 &= \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial x} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \\
 &= \mu \nabla^2 u + \mu \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \\
 &= \mu \nabla^2 u - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \mathbf{u})
 \end{aligned} \tag{Ec. I.41}$$

Equivalentemente, en los ejes  $y$  y  $z$  resulta

$$\begin{aligned}
 & \mu \nabla^2 v - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial}{\partial y} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \\
 & \mu \nabla^2 w - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial}{\partial z} (\nabla \cdot \mathbf{u})
 \end{aligned}$$

Por lo que, el término viscoso general se expresa como

$$\mu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{2}{3}\mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u})$$

En general

$$\begin{aligned}
 & \rho \left( \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \\
 &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) \\
 &+ \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \right) + \rho g_i
 \end{aligned} \tag{Ec. I.43}$$

O, de forma más compacta en notación vectorial,

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] - \nabla \left( \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \rho \mathbf{g} \tag{Ec. I.44}$$

Que, utilizando la derivada sustancial y el operador laplaciano, queda reescrito como

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{2}{3}\mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \tag{Ec. I.45}$$

Que es la **ecuación de Navier-Stokes para fluidos newtonianos compresibles**.

La **ecuación de continuidad** (conservación de masa) asociada es:

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

Ec. I.46

## 2.5 Fluidos newtonianos incompresibles

Para el caso especial, aunque muy común, de flujos incompresibles, la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento se simplifica de manera significativa. Se tienen en cuenta las siguientes suposiciones:

- La viscosidad  $\mu$  será ahora constante
- El efecto de la segunda viscosidad será ahora  $\lambda = 0$
- La ecuación de continuidad se simplifica a  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$

### El tensor de esfuerzos para fluidos newtonianos incompresibles

Como se ha visto anteriormente, para un fluido newtoniano:

$$\bar{\sigma} = -p\bar{\mathbf{I}} + \bar{\tau}$$

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \nabla \cdot \mathbf{u}$$

Si se supone que el fluido es incompresible, el tensor se simplifica a:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

$$\bar{\sigma} = -p\bar{\mathbf{I}} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) = -p\bar{\mathbf{I}} + 2\mu\bar{\mathbf{e}}$$

Siendo  $\bar{\mathbf{e}}$  el *tensor velocidad de deformación*, definido como:

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).$$

Tomando ahora sólo los términos viscosos de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en el eje  $x$ , por ejemplo, se tiene:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left( 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) \\ &= 2\mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial x} \\ &= \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial x} \end{aligned}$$

$$= \mu \nabla^2 u + \mu \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) = \mu \nabla^2 u$$

Donde la expresión entre paréntesis se anula por la ecuación de continuidad ( $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ).

De manera similar para las ecuaciones en los ejes  $y$  y  $z$ , se tiene  $\mu \nabla^2 v$  y  $\mu \nabla^2 w$ .

Con lo que la **ecuación de Navier-Stokes para flujo newtoniano incompresible** resulta:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad \text{Ec. I.47}$$

Los únicos términos no lineales para flujos newtonianos incompresibles son los convectivos. La aceleración convectiva ( $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ ) se debe al cambio de velocidad (transitorio o estacionario) a través del espacio.

Otra observación importante es que la viscosidad se representa mediante el vector Laplaciano del campo de velocidades, interpretado aquí como la diferencia entre la velocidad en un punto y la velocidad media en un pequeño volumen a su alrededor. Esto implica que, para un fluido newtoniano, la viscosidad actúa como una *difusión de la cantidad de movimiento*, de manera equivalente a la difusión del calor en la ecuación del calor, también expresada por medio del Laplaciano.

Si se desprecian los efectos causados por la temperatura, la única otra ecuación necesaria (además de las condiciones iniciales y de contorno) es la ecuación de continuidad o conservación de masa. Bajo la hipótesis de incompresibilidad, la densidad de todo elemento fluido es constante, y la ecuación de continuidad se simplifica a:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad \text{Ec. I.48}$$

En el último siglo y medio, estas ecuaciones han pasado el test de la aplicación siendo utilizadas por físicos e ingenieros con notable éxito en muy diversos campos, entre ellos la hidráulica, la meteorología y la aeronáutica, y su rango de validez está bien establecido.

Pertenecen ya, junto a las ecuaciones de Newton, Schrödinger y Maxwell, a las ecuaciones básicas de la Física.

### 3 Ecuaciones adicionales

El sistema formado por las dos leyes anteriores, (I.47) y (I.48), contiene cuatro ecuaciones, la LCM escalar y la LCCM vectorial, e implica a cinco variables: la densidad  $\rho$ , las tres componentes de la velocidad  $\mathbf{u}$  y la presión  $p$ . Es pues indeterminado y necesita una o varias nuevas leyes en función de las suposiciones que se hagan. Estas leyes adicionales en algunos casos consisten en una ecuación de estado y una ecuación de conservación de la energía.

La ecuación de estado depende del contexto (normalmente la ley de gases ideales), y suele definir el comportamiento de la presión. Por otra parte, la ecuación de conservación de la energía será:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{D\rho}{Dt} + \nabla \cdot (k\nabla T) + \Phi \quad \text{Ec. I.49}$$

Donde  $h$  es la entalpía,  $T$  es la temperatura,  $k$  es la conductividad térmica, y  $\Phi$  es una función que representa la disipación de energía por efectos viscosos:

$$\begin{aligned} \Phi = \mu \left( 2 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right. \\ \left. + \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 \right) + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \end{aligned} \quad \text{Ec. I.50}$$

Mediante una buena ecuación de estado y buenas funciones de dependencia de los parámetros (como la viscosidad) en función de las variables, este sistema de ecuaciones consigue representar apropiadamente la dinámica de todos los gases conocidos y la mayoría de los líquidos.

Se concluye pues que la descripción de los fluidos “reales” implica modelos de una notable envergadura matemática, aún hoy día, difíciles de abordar, incluso a nivel computacional.

## 4 Ecuación del modelo de un contaminante

La presencia de un gas contaminante en cualquier punto del espacio estará representada por una cantidad escalar, a la que se le llamará  $S$ , y que variará entre 0 y 1, indicando así la proporción de masa del contaminante sobre el total de masa de la mezcla (aire + contaminante) en cada punto, es decir, su *concentración*.

Por lo tanto, es preciso plantear la conservación del escalar para hallar la ecuación que dicta su comportamiento.

### 4.1 Conservación de cantidades escalares

A partir del teorema de transporte de Reynolds visto anteriormente

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} L dV = - \int_{\partial\Omega} L \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA - \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV \quad \text{Ec. I.51}$$

Donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad del fluido y  $Q$  representa las fuentes y sumideros dentro del fluido, tomando los sumideros como positivos.

Sustituyendo  $L$  por  $\rho S$  y  $-\int_{\Omega} \mathbf{Q} dV$  por  $\sum f_S$  se tiene

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho S dV + \int_{\partial\Omega} \rho S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA = \sum f_S \quad \text{Ec. I.52}$$

Donde  $f_S$  representa el transporte del escalar  $S$  por mecanismos distintos a la convección (que ya está incluida en el término  $\int_{\partial\Omega} \rho S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA$ ), así como cualquier fuente o sumidero del escalar.

El transporte por medio de la difusión siempre está presente, de manera que

$$\sum f_S = f_S^d + \int_{\Omega} q_S dV \quad \text{Ec. I.53}$$

Donde  $f_S^d$  representa el transporte del escalar  $S$  por mecanismos de difusión, que se suele describir por una aproximación de gradiente, como la *ley de Fourier* para la difusión de calor y la *ley de Fick* para la difusión de masa. En este caso:

$$f_S^d = \int_{\partial\Omega} \Gamma \nabla S \cdot \mathbf{n} dA \quad \text{Ec. I.54}$$

Donde  $\Gamma$  es la difusividad de la cantidad  $S$ .

De esta forma, el término  $\sum f_S$  queda como

$$\sum f_S = \int_{\partial\Omega} \Gamma \nabla S \cdot \mathbf{n} dA + \int_{\Omega} q_S dV \quad \text{Ec. I.55}$$

Por lo que

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho S dV + \int_{\partial\Omega} \rho S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA = \int_{\partial\Omega} \Gamma \nabla S \cdot \mathbf{n} dA + \int_{\Omega} q_S dV \quad \text{Ec. I.56}$$

En este punto, aplicando el *teorema de la divergencia* a las integrales de superficie (denotada por  $\partial\Omega$ ), se transforman en una integral de volumen:

$$\int_{\partial\Omega} \rho S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) dV \quad \text{Ec. I.57}$$

$$\int_{\partial\Omega} \Gamma \nabla S \cdot \mathbf{n} dA = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\Gamma \nabla S) dV \quad \text{Ec. I.58}$$

Resultando la ecuación de transporte

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho S dV + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) dV = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\Gamma \nabla S) dV + \int_{\Omega} q_S dV \quad \text{Ec. I.59}$$

Aplicando la *regla de Leibniz* a la integral de la izquierda y combinando todas las integrales se obtiene:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho S}{\partial t} dV + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) dV = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\Gamma \nabla S) dV + \int_{\Omega} q_S dV$$

$$\Rightarrow \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \rho S}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\Gamma \nabla S) - q_S \right) dV = 0$$
Ec. I.60

La integral debe ser igual a cero para **cualquier** volumen de control, lo cual sólo se cumple si el integrando mismo es igual a cero, de manera que:

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\Gamma \nabla S) - q_S = 0$$
Ec. I.61

Si describimos  $\Gamma$  como  $\rho D_S$ , entonces la ecuación de transporte de un escalar resultante es

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho D_S \nabla S) + q_S$$
Ec. I.62

Donde  $D_S$  es la difusividad del escalar  $S$  dentro del fluido de estudio.

## 4.2 Densidad variable debida a la presencia del contaminante

A pesar de que se considera el flujo de aire como incompresible debido a que su velocidad no es lo suficientemente alta ( $< \sim 100 \text{ m/s}$ ), sí se incluye el efecto de que el gas contaminante pueda tener una densidad diferente a la del aire, que es el medio donde se libera.

De este modo es necesario introducir una ecuación que haga variar la densidad del aire según la concentración del contaminante en cada punto para casos en los que la densidad del contaminantes se salga de un rango del 2 % respecto de la densidad del aire que lo contiene (2).

Estableciendo que el volumen específico de la mezcla es el promedio de volúmenes específicos de aire y contaminante, se tiene la siguiente ecuación.

$$\frac{1}{\rho} = \frac{S}{\rho_c} + \frac{1-S}{\rho_a}$$
Ec. I.63

Donde  $\rho_c$  es la densidad del contaminante en unas condiciones dadas,  $\rho_a$  es la densidad del aire en esas mismas condiciones, y  $\rho$  es la densidad de la mezcla. De este modo la densidad se verá afectada en las zonas donde el escalar  $S$  haya sido transportado.

Esta ecuación controlará la evolución de la densidad del flujo en el modelo matemático.



## 5 Turbulencia

### 5.1 Flujos turbulentos

En ingeniería, la mayoría de los flujos son turbulentos, por lo que requieren un tratamiento específico para este régimen. Los flujos turbulentos se caracterizan por las siguientes propiedades:

- Son muy inestables. Los puntos en una gráfica velocidad-tiempo aparecen de forma aparentemente aleatoria para un observador no familiarizado con estos puntos.
- Son tridimensionales. La velocidad media puede ser una función en dos coordenadas, pero el campo instantáneo fluctúa rápidamente en las tres dimensiones espaciales.
- Su vorticidad es muy alta. De hecho, estirar los vórtices es uno de los principales mecanismos para aumentar la turbulencia de un flujo.
- La turbulencia incrementa la rapidez con la que las propiedades que se conservan se mezclan. El mezclado es un proceso en el cual parcelas de fluido con concentraciones diferentes de al menos una de las propiedades que se conservan se ponen en contacto. Este proceso ocurre a través del mecanismo de difusión, por lo que suele denominarse *difusión turbulenta*.
- Se trata de un proceso disipativo. Al ponerse en contacto dos parcelas con diferente cantidad de movimiento, se reduce el gradiente de velocidad por acción de la viscosidad, causando una reducción de la energía cinética del flujo, que se transforma irreversiblemente en energía interna del fluido.
- Los flujos turbulentos contienen estructuras coherentes, es decir, eventos repetibles y esencialmente deterministas que son responsables de una gran parte del proceso de mezcla. Sin embargo, la componente aleatoria de los flujos turbulentos hace que estas estructuras sean diferentes entre ellas en cuanto a tamaño, fuerza y frecuencia de ocurrencia, haciendo su estudio muy difícil.
- Los flujos turbulentos fluctúan en un amplio rango de escalas de longitud y tiempo. Esta propiedad hace su simulación directa muy difícil. (ver más abajo)

Todas estas propiedades son importantes. Los efectos producidos por la turbulencia pueden, o no, ser deseables, dependiendo de la aplicación.

### 5.2 Modelos de turbulencia

El sistema al que se ha llegado anteriormente, formado por las ecuaciones de Navier-Stokes, junto a otras leyes empíricas para la dependencia de la viscosidad y de la conductividad térmica con otras variables del flujo, y por una ley constitutiva que defina la naturaleza del fluido, describe completamente todos los fenómenos de flujos.

Para flujos laminares no se necesita ningún tipo de información adicional, y se puede considerar que cualquier experimento de un flujo en régimen laminar puede ser duplicado con

precisión de manera computacional. Sin embargo, la mayoría de las situaciones en la naturaleza y en aplicaciones tecnológicas involucran flujos en una forma particular de inestabilidad llamada *turbulencia*. Esto ocurre en todos los flujos donde el número de Reynolds sobrepasa cierto valor crítico, definido dicho número como

$$Re = \frac{uD}{\nu}, \quad \text{Ec. 1.64}$$

Donde  $u$  y  $D$  son valores representativos de la velocidad y la longitud característica del flujo, y  $\nu$  es la viscosidad cinemática del fluido.

Generalmente se cree que este fenómeno se debe a la inercia del fluido como un todo: la culminación de la aceleración temporal y convectiva; por tanto, los flujos donde los efectos inerciales son pequeños tienden a ser laminares (cuantificado por el número de Reynolds). Se cree, aunque no se sabe con certeza, que las ecuaciones de Navier-Stokes describen la turbulencia de manera apropiada.

Esta forma particular de inestabilidad del régimen turbulento se caracteriza por la presencia de fluctuaciones estadísticas de todas las variables del flujo. Estas fluctuaciones se pueden suponer superpuestas en valores medios y pueden suponer en muchas situaciones un 10% de los valores medios globales del flujo, llegando a niveles mucho más altos en ciertas regiones del flujo, como en zonas separadas.

La solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos turbulentos es extremadamente complicada de obtener, y los intentos por resolver flujos turbulentos utilizando un *método* para flujos laminares resultan en soluciones inestables que no logran converger convenientemente. Para contrarrestar esto, en la práctica en la simulación de fluidos computacional se utilizan aproximaciones que consisten en ecuaciones ponderadas en el tiempo acompañadas de modelos de turbulencia.

Mientras que en el pasado el método principal de estudio de la turbulencia era experimental, actualmente existen varios métodos numéricos con este fin:

- El primero involucra el uso de *correlaciones* que dan el factor de fricción en función del número de Reynolds, o el número de Nusselt de transferencia de calor como función de los números de Reynolds y de Prandtl. Este método es muy útil pero está limitado a tipos de flujo simples que se puedan caracterizar por unos pocos parámetros.
- El segundo método usa *ecuaciones integrales* que pueden obtenerse integrando las ecuaciones de movimiento en una o más coordenadas. Esto reduce normalmente el problema a una o varias ecuaciones diferenciales ordinarias de fácil solución.
- El tercero se basa en ecuaciones obtenidas promediando en el tiempo las ecuaciones de movimiento (si el flujo es estadísticamente estacionario), en una coordenada en la que el flujo medio no varíe, o sobre un conjunto de materializaciones (realizations) (un conjunto imaginario de flujos donde todos los factores controlables se mantienen fijos). Este enfoque se denomina *one-point closure* (clausura de un punto) y lleva a un conjunto de ecuaciones en diferencias parciales llamadas Reynolds-averaged Navier-

Stokes (o RANS). Este modelo no forma un conjunto cerrado de ecuaciones por lo que requiere de la introducción de aproximaciones (*modelos de turbulencia*), como los Spalart-Allmaras,  $k-\omega$  ( $k$ -omega),  $k-\epsilon$  ( $k$ -épsilon), y modelos SST.

- El cuarto tipo de método se denomina *two-point closure* (clausura de dos puntos). Utiliza ecuaciones para la correlación de los componentes de la velocidad en dos puntos espaciales o, más frecuentemente, la transformada de Fourier de estas ecuaciones. Se usa en contadas ocasiones, sólo en casos de turbulencia homogénea.
- El quinto es el *Large Eddy Simulation* (LES) y halla la solución para los movimientos de escala mayor mientras aproxima solamente los movimientos de menor escala. Se puede considerar como un compromiso entre los métodos de clausura de un punto y la simulación numérica directa, comentada a continuación.
- Finalmente, existe la *simulación numérica directa* (DNS), en la cual se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes para los movimientos de todas las escalas del flujo.

Conforme se avanza en la anterior lista, se realizan más cálculos directos y menos aproximaciones, por lo que los últimos métodos son más exactos, aunque su coste computacional aumenta considerablemente. En el caso de la simulación numérica directa, debido a las significativamente diferentes escalas de longitud involucradas en el proceso de mezcla, la solución estable de un flujo de este tipo requiere una resolución de mallado tan alta que el tiempo de cálculo computacional se vuelve excesivo, por lo que este método que da descartado.

Todos los métodos descritos requieren la solución de alguna forma de las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento, energía o especies químicas. La mayor dificultad estriba en que los flujos turbulentos contienen variaciones en rangos de escalas de tiempo y longitud mucho más amplios que en flujos laminares. Por eso, aunque las ecuaciones sean similares, en flujos turbulentos serán más difíciles y costosas de resolver.

### 5.3 Método RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)

De entre los modelos anteriormente comentados, los más comunes son los modelos LES y RANS, debido a que no suponen un coste computacional tan alto como en el cálculo directo (DNS) y a que su nivel de precisión suele ser lo suficientemente alto para ser utilizados en aplicaciones de ingeniería, donde no interesa conocer más que unas cuantas propiedades cuantitativas en un flujo turbulento.

Para decantarse por LES o RANS hay que tener en cuenta diversas consideraciones. Los resultados de LES muestran un buen nivel de concordancia con datos experimentales en términos de velocidad media y de energía turbulenta alrededor de un edificio aislado y, en general, son más precisos que RANS debido a que resuelven una gran parte de las escalas de la turbulencia. Sin embargo, el tiempo de cómputo requerido es normalmente de 10 a 25 veces mayor en LES que en RANS. Además, a pesar de no predecir de forma tan exacta las

fluctuaciones instantáneas de concentración, los cálculos no estacionarios de RANS (unsteady-RANS o URANS) pueden reproducir estructuras estacionarias con una resolución espacial y temporal menor que las requeridas por LES. (3)

Teniendo esto en cuenta, será el método RANS el que se utilice como modelo de turbulencia en este proyecto.

Dentro de los modelos tipo RANS, en este proyecto se utiliza el llamado SST k-omega, por ser de los más populares actualmente.

# ANEXO II: Enfoque del problema de dispersión

Hasta hace poco, los estudios de la calidad del aire urbano se basaban en la utilización de los llamados modelos operacionales, derivados de la naturaleza integral de la dispersión atmosférica. Estos modelos, que están mayoritariamente basados en el modelo de dispersión Gaussiano, son frecuentemente denominados “modelos de respuesta rápida”. Éstos son a menudo modificados con diversos propósitos, de manera que puedan resolverse multitud de casos diferentes de manera eficaz. En la actualidad, ya no son simples modelos de penacho gaussianos, y pueden incluir muchos y complicados procesos de dispersión, como estratificación atmosférica, flotabilidad, reacciones químicas, deposiciones, fluctuaciones en la concentración, etc. Sin embargo, no son capaces de analizar en detalle el comportamiento del penacho, afectado por los edificios de forma explícita, debido a la deducción del modelo. Por lo tanto, existen limitaciones a la hora de aplicar estos modelos a casos de dispersión en área cercana.

Otro método más orientado al diseño práctico en relación a la dispersión cercana alrededor de edificios está basado en el llamado modelo de ASHRAE. Este modelo surge del análisis de una gran cantidad de resultados de experimentos en túneles de viento. Se trata, por tanto, de un modelo semi-empírico, y se usa especialmente en el diseño de edificios aislados, aunque tiene una limitada aplicación y menos precisión cuando se trata de configuraciones de varios edificios.

Actualmente, durante las dos últimas décadas, las simulaciones de CFD (Dinámica de Fluidos Computacional) han sido ampliamente utilizadas como un emergente método de análisis de la dispersión de contaminantes alrededor de edificios y en áreas urbanas, como alternativa a los test en túnel de viento.

El método de simulación CFD aplicado a este caso consiste en resolver la ecuación de transporte de la concentración (difusión y advección) a partir del campo de velocidades obtenido de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Recientemente, este método se ha usado ampliamente en la evaluación de la dispersión de contaminantes alrededor de edificios. Sin embargo, estos estudios se han realizado con diferentes objetivos, configuraciones, condiciones de contorno y modelos. Esto hace difícil determinar las ventajas y limitaciones de la simulación CFD de dispersión de contaminantes en área cercana en medios urbanos que, como se ha mencionado, se caracteriza por la compleja interacción existente entre el flujo atmosférico y el flujo alrededor de los obstáculos urbanos. Este tipo de fenómenos involucran aspectos tanto meteorológicos como otros relacionados con la aerodinámica de los edificios, sin embargo, la mayoría de la investigación realizada hasta la fecha se centra en cada uno de estas características por separado. Así pues, para realizar simulaciones CFD es necesario un análisis cruzado de estos aspectos.

# 1 Características de la atmósfera urbana

Para comenzar a enfocar el problema de la dispersión urbana de materiales peligrosos, deben entenderse los procesos físicos que caracterizan el medio aéreo dentro de zonas urbanas y en sus alrededores. Las grandes densidades de población que caracterizan a las áreas urbanas producen inevitablemente una gran cantidad de emisiones antropogénicas, entre las que se incluyen las emisiones de automóviles, de industrias y de plantas de potencia. Las estrategias para mitigar el impacto de estas emisiones en poblaciones locales son esenciales para la sostenibilidad de las ciudades.

La actividad humana se concentra generalmente en la zona más baja de la atmósfera, de manera que las fuentes contaminantes se crean en esta zona. El reto del modelizado de la dispersión de contaminantes consiste pues en entender el proceso de mezcla de los materiales debido a la turbulencia y cómo son transportados desde el punto de emisión hacia escalas más grandes.

La capa de mezcla que se forma en la zona más baja de la atmósfera se denomina Atmospheric Boundary Layer (ABL). Ésta se caracteriza fundamentalmente por un gran esfuerzo cortante resultante de la transmisión de la cantidad de movimiento en la superficie. La estructura exacta de la ABL viene determinada por la forma de la superficie así como por las características de los vientos geostroáficos que la recorren. Los vientos geostroáficos son un fenómeno a escala global derivado del equilibrio entre la presión y las fuerzas de Coriolis. Para condiciones de estabilidad neutra, la profundidad de la ABL puede variar de varios cientos de metros hasta más de mil, dependiendo de la velocidad del viento. La estabilidad neutra es a menudo un supuesto adecuado para las ABL sobre áreas urbanas, especialmente durante periodos de noche, ya que los factores físicos como el arrastre superficial debido a la rugosidad y el almacenamiento de calor favorecen estas condiciones.

## 2 Consideraciones de escala

En este punto, para analizar el movimiento de la capa más baja de la atmósfera en mejores condiciones, es útil reconocer las múltiples escalas de la naturaleza del medio y tratar el fenómeno en función de éstas.

Una vez emitidos a la atmósfera, los procesos mediante los cuales los contaminantes se propagan son, por un lado, la difusión, y por otro, la advección, en una serie de escalas de longitud horizontales que pueden clasificarse en escalas de corta distancia (*escala local*) o de larga distancia (*mesoescala*).

*Mesoescala* se puede definir como “el transporte y difusión de contaminantes del aire a través de distancias horizontales entre 2 y 2000 kilómetros en periodos de entre 1 y 48 horas”. Los extremos más bajos de estos intervalos no presentan resultados precisos y presentan cierto solapamiento con los modelos de *escala local*. La diferencia clave entre ambas escalas consiste en el tipo de contaminante y su impacto tras su difusión. Los modelos de mesoescala tratan

con escapes duraderos de sustancias que siguen teniendo un efecto negativo tras su dilución incluso a concentraciones bajas, como polvo volcánico o materiales radioactivos. Por otra parte, los modelos a escalas locales, en los que se centra este proyecto, operan bajo la premisa de que la dilución reduce el peligro del contaminante en última instancia, y se presentan en un rango de sub-escalas que va desde ciudades hasta edificios aislados.

Los procesos globales que dirigen las condiciones atmosféricas de cada región y la formación de la ABL a *escalas de ciudad* no entran dentro del objetivo de este proyecto. En su lugar, se discutirán los fenómenos de flujos que afectan a la dispersión en las escalas correspondientes a edificios aislados y agrupaciones en forma de calles.

Por otra parte, a *escalas locales* menores es necesario tener en cuenta el efecto del transporte vertical de los contaminantes si se quiere tratar el problema con precisión. La distribución de los contaminantes en una zona urbana obedece, obviamente, a la interacción del penacho del contaminante liberado con campo de velocidades del aire a través de las calles, además de los mecanismos de transferencia entre el aire de esta zona y el flujo inmediatamente superior a los edificios, donde predominan flujos turbulentos que rara vez se miden experimentalmente. El campo resultante cubre las concentraciones tanto en las calles circundantes como en la superficie misma de los edificios, por lo que es importante considerarlo cuando la calidad del aire en interiores tiene tanto o más interés que la que existe en el exterior. Éste presenta comúnmente muchas zonas de recirculación, lo que hace que los contaminantes se acumulen y tarden más tiempo en dispersarse.

Con el propósito de observar el desarrollo de este tipo de situaciones, la región de dispersión a tratar se concentra en un rango muy corto, en la vecindad del edificio emisor, hasta varios cientos de metros de éste.

En la *escala de ciudad/barrio*, la ABL se divide en regiones que describen el impacto del medio urbano en el flujo. El desplazamiento horizontal prevalece sobre el vertical, y la influencia de edificios individuales se vuelve relativamente pequeña, por lo que se conceptualiza como el de un flujo a través de una serie de elementos rugosos. En la zona más cercana al suelo, se dice que los edificios se encuentran en la *cubierta urbana* (o *canopy*), que se extiende desde el nivel del suelo hasta la altura del edificio más alto. La cubierta urbana se encuentra dentro de la subcapa rugosa (SR), a la que sigue la subcapa inercial (SI) (Fig. II.1).

La SR es la región donde las propiedades medias del flujo y de la turbulencia dependen de los detalles específicos de la rugosidad (edificios, árboles,...) (4). La definición exacta de su extensión varía a través de la literatura. La frontera inferior se considera a veces como la altura media de los edificios y en otros casos como la *altura de desplazamiento del plano cero*,  $d$ , definida en base a un perfil de velocidad logarítmico, y a partir del cual la velocidad puede considerarse constante ( $U_\infty$ ) (5). La frontera superior de la SR aparece cuando la variación horizontal de los parámetros de flujo y turbulencia causados por la cubierta urbana disminuye, aunque la aplicación exacta de este concepto no es siempre la misma. En experimentos de túnel de viento, en (6) se define como la “altura de convergencia” de perfiles verticales tomados por todo el dominio modelado.

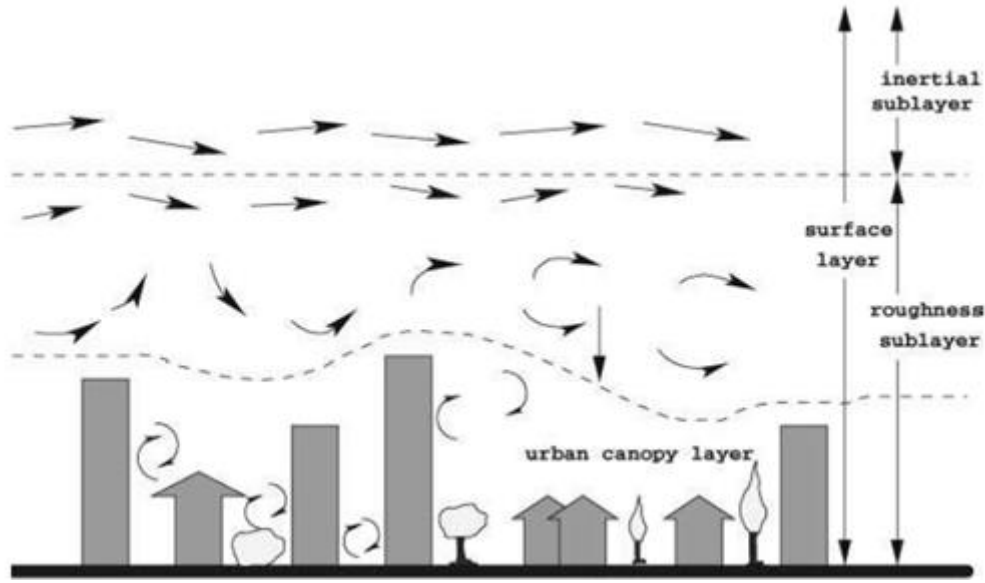


Figura II.1: Capas de flujo sobre un medio urbano, de (7).

La SI es por definición una capa de esfuerzo cortante constante donde se aplican los argumentos de similitud de Monin-Obukhov (8). Para condiciones estables en una superficie rugosa, esto lleva a un perfil de velocidad logarítmico de la siguiente forma:

$$U(z) = \frac{u_\tau}{\kappa} \ln \left( \frac{z-d}{z_0} \right) \quad \text{Ec. II.1}$$

Donde  $u_\tau$  es la velocidad de fricción,  $z_0$  es la altura de la rugosidad característica y  $d$  es la anteriormente citada altura de desplazamiento. El término  $d$  representa el nivel en el que el arrastre de la superficie media actúa, mientras que  $z_0$  es una medida de rugosidad que representa de la magnitud de ese arrastre (9). Los valores de  $z_0$  y  $d$  han sido tabulados a partir de datos experimentales para una variedad de superficies desde campos de cereales y bosques hasta carreteras y ciudades. El rango descrito para cada tipo de superficie ilustra la naturaleza aproximada con que se suelen interpretar  $z_0$  y  $d$ . La complejidad para determinar un valor preciso se debe al hecho de que  $z_0$  y  $d$  no sólo dependen de las propiedades geométricas específicas de los elementos rugosos, sino también de las condiciones del flujo.

Aun así, los perfiles de velocidad logarítmicos se utilizan no sólo en el rango donde son estrictamente válidos, sino que se extiende en la subcapa rugosa (SR). Esto se hace a causa de una falta de información sobre la cubierta urbana y que es generalmente una aproximación aceptable en el estudio de penachos grandes y elevadas; sin embargo, para el transporte a menor alcance a nivel del suelo este método no es suficiente.

Por otro lado, la *escala de calle* invita a otro nivel de descripción del flujo y de terminología. En esta escala uno debe concentrarse en los detalles de las complejas interacciones entre las condiciones del flujo dominante y las numerosas particularidades geométricas del medio. Esto



incluye complejos patrones del flujo medio así como la generación de turbulencia por la acción cortante con las superficies de los edificios.

Esta escala permite una reproducción detallada del fenómeno. Sin embargo, no es factible resolver el flujo a menor escala alrededor de cada edificio individual, por lo que deben realizarse ciertas parametrizaciones derivadas de estudios analíticos y datos experimentales en geometrías muy simplificadas que sean comunes a lo largo de las áreas urbanas (10). Dos de tales geometrías son la *calle encajonada* y la *intersección*. La comprensión de estas geometrías se ve facilitada por ciertos criterios, que caracterizan los patrones de flujo que se forman sobre una serie de edificios basándose en la separación entre ellos. La Figura II.2 representa los regímenes de rugosidad aislada (a), de interferencia de estelas (b), y de flujo rasante (c).

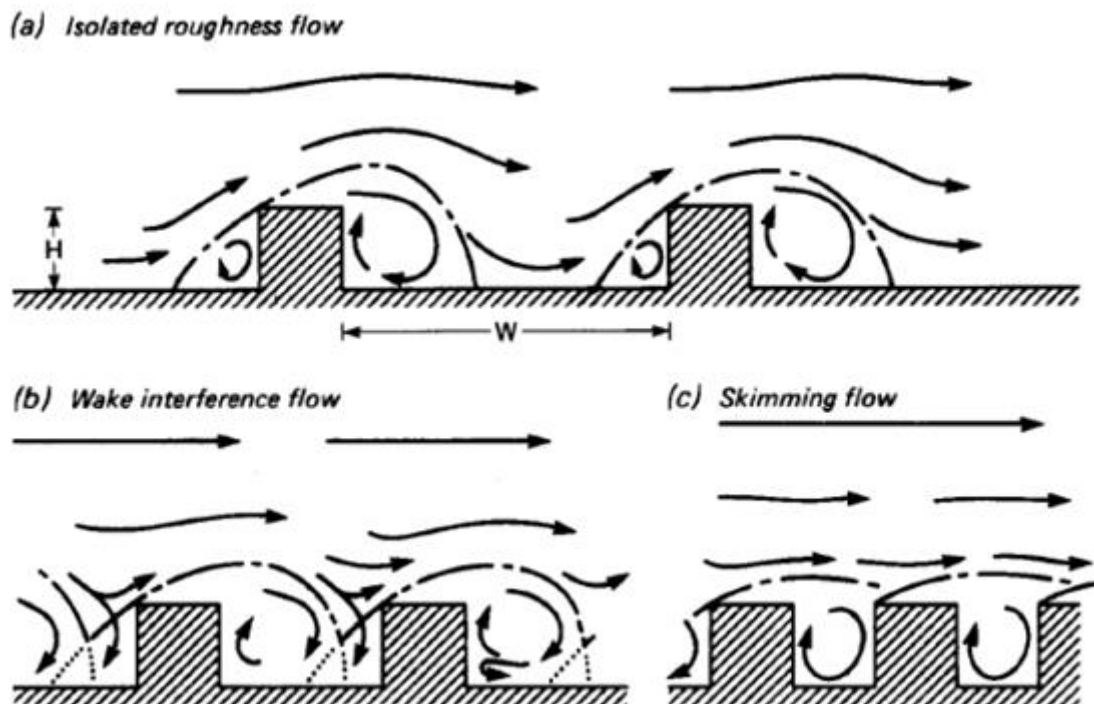


Figura II.2: Regímenes de flujo basados en la separación entre edificios, de (11).

El *régimen de rugosidad aislada* es aquél donde la separación entre edificios es lo suficientemente grande como para que la estructura del flujo a su alrededor sea la misma que alrededor de un objeto aislado. Al abordar el *régimen de interferencia de estelas*, el flujo descendiente del lado de sotavento de un edificio se ve reforzado por el flujo de barlovento del edificio siguiente. Si los edificios están lo suficientemente cerca para hacer posible el *flujo rasante*, un patrón de recirculación se forma entre los edificios donde el grueso del flujo no penetra. La separación exacta a la que ocurre la transición entre varios regímenes depende de la relación entre las dimensiones horizontales del edificio con su altura (11). Adicionalmente, el estudio de diferentes configuraciones de calles encajonadas ha mostrado una variedad de comportamientos de flujo que no se incluyen en la Figura II.2, que van desde el aleteo de la

capa límite viscosa del tejado hasta un patrón del flujo a lo largo de toda la calle cuando la dirección del viento de entrada se inclina.

Las *intersecciones* han sido identificadas como otra característica clave de las geometrías urbanas. Los estudios de dispersión en intersecciones han sido motivados por las emisiones en situaciones de tráfico congestionado. Belcher describe cómo las intersecciones pueden incrementar la acción de mezclado a través de dos efectos: la creación de vórtices horizontales y la división de líneas de corriente (10). Las capas límite desprendidas en las esquinas de los edificios producen vórtices horizontales. Si el flujo medio no está perfectamente alineado con una calle de la intersección, entonces el flujo se desvía creando una línea de corriente que se desvía. Las pequeñas fluctuaciones turbulentas que transportan a un contaminante a través de una línea de corriente como ésta ven incrementado el efecto de la dispersión resultante.

Por último, los patrones de flujos alrededor de *edificios individuales* han sido estudiados por razones que van más allá de la dispersión de contaminantes. Esas preocupaciones adicionales asociadas al comportamiento de flujos incluyen la eficiencia de sistemas de calefacción y ventilación, así como el confort humano en el exterior de edificios. La característica principal del flujo alrededor de un edificio individual que afecta a la dispersión es la región de su estela. La difusión turbulenta arrastra los contaminantes a esta región dominada por patrones de recirculación de flujo. Los contaminantes que son elevados se mezclan posteriormente al descender, incrementando la concentración a nivel del suelo (Figura II.3).

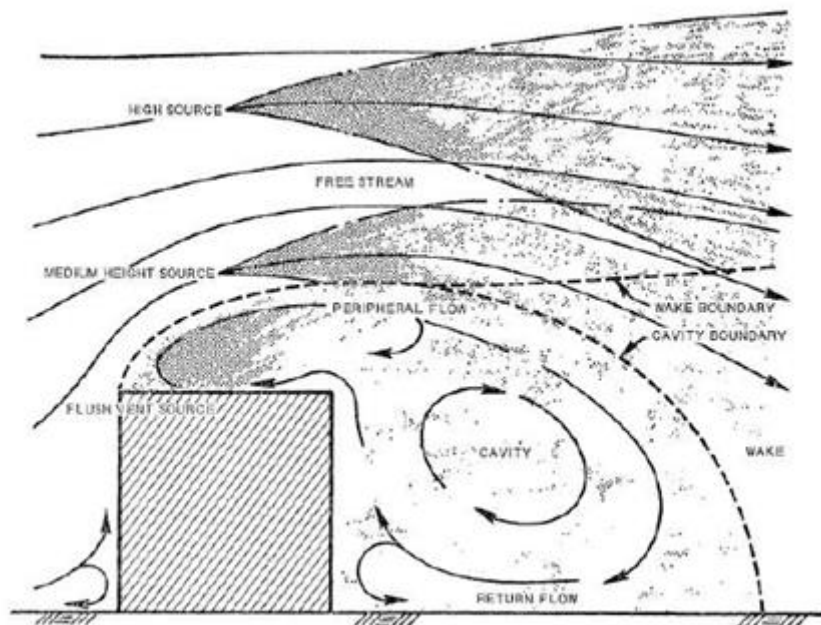


Figura II.3: Patrones de flujo alrededor de un edificio aislado como obstáculo, de (12).

## 3 Marco del modelado de dispersión

En este apartado se repasan varias técnicas de modelado de dispersión hasta poner en contexto el modelado CFD, que es que se utilizará en los análisis posteriores. La escala del problema juega un papel crucial a la hora de elegir el tipo de modelado adecuado en cada caso.

### 3.1 Teoría de la dispersión turbulenta

Antes de discutir varios métodos específicos de modelado de dispersión, es importante hablar del concepto fundamental de difusión turbulenta. G. I. Taylor reconoció la capacidad de difusión en fluidos turbulentos y desarrolló una de las primeras teorías matemáticas sobre dicho proceso (13), llegando a describir la evolución del penacho de una emisión mediante una ecuación de advección-difusión, donde introduce el concepto de *difusividad turbulenta*.

### 3.2 Modelos de orden reducido

#### Modelos de Penacho Gaussiano

Los modelos de penacho gaussiano reciben su nombre de la distribución gaussiana que resulta de resolver una versión simplificada de la ecuación de advección-difusión mencionada en el punto anterior. Debido a que la difusividad turbulenta es desconocida en la práctica y depende de condiciones como la estabilidad atmosférica, este modelo incluye varias parametrizaciones basándose en medidas experimentales y observaciones. El perfil de velocidad se especifica también como una función creciente con la altura para aproximar los efectos cortantes del viento.

#### Modelos de Caja

Los modelos de caja se obtienen simplemente aplicando la conservación de masa en un volumen de control (o “caja”) para determinar los niveles de concentración. Esto lleva a una predicción uniforme de la concentración sin dar información sobre la variación de la misma en el espacio dentro del volumen donde se ha calculado.

#### Modelos de Edificio Aislado

Los modelos de orden reducido pueden contener elementos de los modelos gaussianos y de caja recién mencionados, llegando a modelos que estudian los efectos de un edificio aislado mediante la división del espacio a su alrededor en regiones separadas en función de las características del flujo en cada una de ellas. La región de estela cercana se trata como un volumen bien mezclado y la concentración se calcula mediante balance de masa. Por otro lado,

la región donde el flujo de la estela está más alejado utiliza el modelo de penacho gaussiano para calcular la concentración.

### **3.3 Modelos CFD**

El enfoque principal de este proyecto es la aplicación del modelado CFD a la dispersión escalar. Con este propósito, un “modelo CFD” se refiere a la resolución numérica de la ecuaciones de Navier-Stokes y de transporte de un escalar en una geometría dividida en celdas computacionales discretas. Las ecuaciones aseguran la conservación de masa y de cantidad de movimiento para el fluido (aire) y el escalar (contaminante) involucrados. El modelado en sí entra en acción cuando los movimientos turbulentos ocurren en escalas de longitud y de tiempo demasiado costosas de resolver de manera computacional.

Existen principalmente tres enfoques fundamentales en la simulación de fluidos computacional (DNS, LES y RANS), los cuales se diferencian en la cantidad y en el tipo de parametrizaciones de la turbulencia. Una ventaja clave de todos los modelos de CFD respecto de los modelos discutidos anteriormente es la capacidad de reproducir de manera más efectiva los efectos de geometrías complejas en el proceso de dispersión. La geometría se trata de forma natural en un modelo CFD como una condición de contorno, en lugar de a través de parametrizaciones empíricas de soluciones analíticas como en los modelos Gaussianos. Aun así, el enfoque CFD no se libra de sus propias suposiciones en el modelado, las cuales se ven en los siguientes apartados.

### **3.4 Componentes de un modelo CFD**

Los principales “ingredientes” de un modelo CFD o método de solución numérica se describen a continuación.

#### **Modelo matemático**

El punto de partida de cualquier método numérico es el modelo matemático, es decir, el conjunto de ecuaciones en derivadas parciales (o integro-diferenciales) y de condiciones iniciales y de contorno. La elección del modelo apropiado depende de la aplicación concreta sobre la que se quiera aplicar (flujo incompresible, ideal, turbulento, bi-tridimensional, etc.). Cada modelo puede incluir simplificaciones de las leyes de conservación exactas.

Los métodos numéricos se diseñan para cada conjunto específico de ecuaciones. Intentar crear un método general aplicable a todo tipo de flujos no es práctico (si no imposible) y no resulta óptimo para ninguna aplicación.

Tanto las ecuaciones del modelo como sus condiciones de contorno se comentan en los siguientes apartados.

## **Método de discretización**

Después de elegir el modelo matemático, se debe elegir un método adecuado de discretización, es decir, un método de aproximación de las ecuaciones diferenciales por un sistema de ecuaciones algebraicas para las variables en un conjunto discreto de puntos en el espacio y en el tiempo. Existen muchos enfoques, pero los más importantes son los métodos de diferencias finitas (FDM), de volúmenes finitos (FVM) y de elementos finitos (FEM). Otros métodos como esquemas espectrales, métodos de elementos de contorno y autómatas celulares se utilizan en CFD pero su uso se limita a clases especiales de problemas.

Todos los métodos tienden a producir la misma solución si la malla es muy fina. Sin embargo, algunos son más apropiados que otros para algunas clases de problemas. En este caso, las ventajas del *método de volúmenes finitos* hacen especialmente adecuado su uso.

Este método aprovecha al máximo la flexibilidad que da trabajar con mallas arbitrarias, donde se abre un gran número de opciones a la hora de definir los volúmenes de control alrededor de los cuales se expresan las leyes de conservación. Modificar la forma y la localización de los volúmenes de control asociados a un punto de la malla, así como variar las reglas y la precisión en la evaluación de los flujos a través de sus superficies de control, le da una considerable flexibilidad a este método. Además, al discretizar directamente las leyes de conservación en su forma integral, se asegura la conservación a nivel discreto de las variables como la masa, la cantidad de movimiento y la energía. Esta es la propiedad más fundamental de los métodos numéricos. (14)

El software utilizado en este proyecto (OpenFOAM) es una herramienta basada en esquemas de volúmenes finitos especialmente orientada para la simulación numérica en mecánica de fluidos.

## **Sistemas de coordenadas y bases vectoriales**

Las ecuaciones de conservación pueden escribirse de muy diversas formas, dependiendo del sistema de coordenadas y la base vectorial utilizados. Por ejemplo, uno puede elegir sistemas de coordenadas cartesianos, cilíndricos, esféricos o curvilíneos, ortogonales o no ortogonales, que pueden ser fijos o móviles. La elección depende del problema a resolver en cuestión, y puede influir en el método de discretización a escoger, así como en el tipo de malla a utilizar.

En este caso, se utilizará el sistema de coordenadas cartesianas debido a que las geometrías que se van a estudiar son principalmente combinaciones de elementos paralelepípedicos, siendo pues éste el sistema más conveniente a la hora de expresar las ecuaciones.

## **Malla numérica**

Las localizaciones discretas en las que se calcularán las variables vienen definidas por una malla numérica, que es esencialmente una representación discreta de la geometría del dominio donde el problema ha de ser resuelto. Ésta divide el dominio de la solución en un

número finito de subdominios (elementos, volúmenes de control, superficies, etc.). Algunas de las opciones disponibles a la hora de construir una malla son las siguientes:

- Malla estructurada uniforme

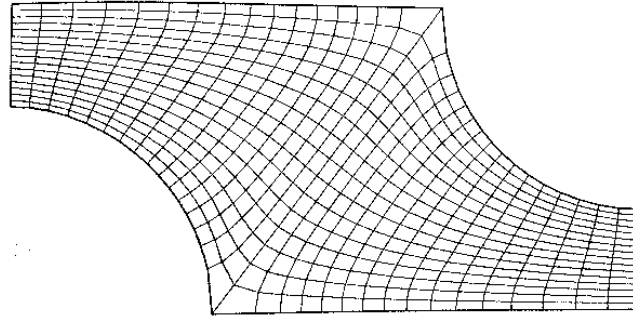


Fig. II.4. Ejemplo de una malla bidimensional, estructurada, no ortogonal, diseñada para calcular un flujo en un segmento simétrico de un banco de tubos escalonado, de (15)

- Malla estructurada por bloques

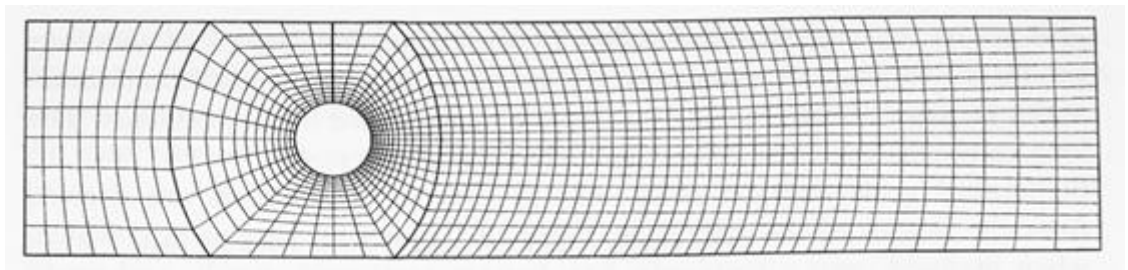


Fig. II.5. Ejemplo de una malla bidimensional, estructurada por bloques, que coinciden en las interfases, diseñada para calcular un flujo alrededor de un cilindro en un canal, de (15)

- Malla no estructurada

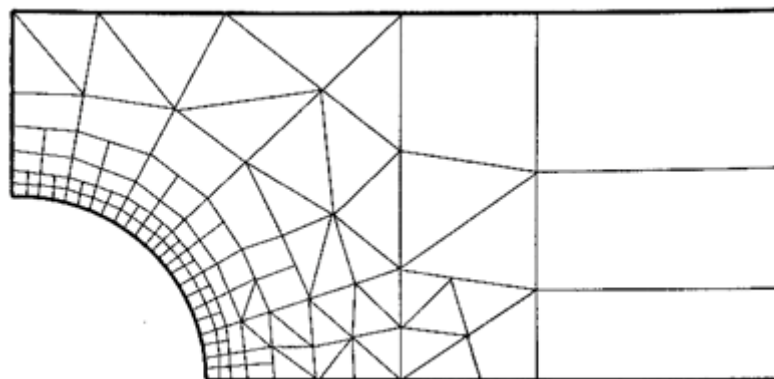


Fig. 2.6. Ejemplo de una malla bidimensional no estructurada, de (15)

En este proyecto se han utilizado las mallas estructuradas por bloques. Dadas las diferencias en la geometría, las mallas son específicas de cada objeto de estudio y serán comentadas en cada caso en los capítulos posteriores.

### **Aproximaciones finitas (discretización de las ecuaciones)**

Tras la elección del tipo de malla hay que seleccionar qué aproximaciones se usarán en el proceso de discretización. En un método de diferencias finitas, por ejemplo, debe seleccionarse una aproximación de las derivadas en los puntos de la malla. En uno de volúmenes finitos, debe hacerse para las integrales de volumen y de superficie. Y en un método de elementos finitos, deben elegirse las funciones de forma y de peso.

Existen muchas posibilidades a la hora de elegir. La elección final tiene influencia sobre la precisión de la aproximación. También afecta a la dificultad en el desarrollo, codificación y depuración del método de solución, así como a la velocidad de cálculo. Aproximaciones más exactas implican un mayor número de nodos y proporcionan mayores matrices de coeficientes, por lo que la memoria requerida aumenta. Esto puede obligar a utilizar mallas más bastas en detrimento de la mayor exactitud que se obtendría. Es por eso que hay que llegar a un compromiso entre simplicidad, facilidad de implementación, precisión y eficiencia computacional, a lo cual se puede llegar mediante la utilización de métodos de segundo orden.

El método de discretización de cada ecuación del modelo matemático se especifica en los archivos que componen cada caso de estudio, lo cual se explica en el capítulo 4.

### **Método numérico/ Algoritmo**

La discretización genera un gran sistema de ecuaciones algebraicas no lineales. El método numérico depende del problema. Para flujos transitorios, se utilizan métodos basados en aquellos que se utilizan en problemas de valor inicial en ecuaciones diferenciales ordinarias (con evolución temporal), resolviendo un problema elíptico en cada paso temporal. Los problemas de flujos estacionarios se resuelven normalmente por evolución pseudo-temporal o algún proceso iterativo equivalente. Debido a que las ecuaciones no son lineales, se hace necesario utilizar procesos iterativos. Estos métodos usan linealizaciones sucesivas de las ecuaciones y el sistema de ecuaciones lineales resultante casi siempre se resuelve por técnicas iterativas. La elección del método depende del tipo de malla y del número de nodos involucrado en cada ecuación algebraica.

La creación de este algoritmo se explica en el *Anexo IV*.

### **Criterio de convergencia**

Finalmente, se necesita establecer un criterio de convergencia para los métodos iterativos. Normalmente, existen dos niveles de iteraciones: iteraciones internas, dentro de las cuales se resuelven las ecuaciones lineales, e iteraciones externas, que se ocupan de la no linealidad y del acoplamiento entre ecuaciones. Decidir cuándo detener el proceso iterativo en cada nivel es importante desde los puntos de vista de precisión y de eficiencia.

Los criterios de convergencia se especifican en los archivos que componen cada caso de estudio, lo cual se explica en el capítulo 4

### 3.5 Hipótesis en el modelado CFD

En este proyecto se hacen varias suposiciones principales a la hora de modelizar la dispersión de un escalar en un flujo, las cuales se discuten a continuación.

#### Incompresibilidad con densidad variable

La hipótesis de incompresibilidad es apropiada cuando la densidad del fluido no cambia de manera apreciable con la presión, lo cual para el caso del aire corresponde con velocidades de viento menores a los 100 m/s aproximadamente. Sin embargo, la posibilidad del modelo de incluir gases contaminantes con densidades sensiblemente distintas a la del aire, hace necesario considerar su influencia en la densidad del flujo principal a través de una ecuación, que sustituirá a la que definía los efectos de los cambios de presión.

Como parte de esta hipótesis, se considera también que la viscosidad del flujo se mantiene constante.

#### Transporte de un contaminante no reactivo

La difusión de contaminantes se represente en el modelo como el transporte de un escalar, sin tener en cuenta posibles reacciones químicas u otro tipo de cambios como la variación de la temperatura, por ejemplo. En lo único que afecta la presencia del escalar en el flujo es en la densidad de la mezcla, como se ha mencionado anteriormente.

### 3.6 Ecuaciones del modelo

Dadas las hipótesis discutidas en el apartado anterior, las ecuaciones que gobiernen el modelo se muestran a continuación. Su obtención se detalla en el *Anexo I*.

#### Ecuación de Navier-Stokes para flujos incompresibles con densidad variable

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{2}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \quad \text{Ec. II.2}$$

#### Ecuación de continuidad para flujos incompresibles con densidad variable

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \text{Ec. II.3}$$

#### Ecuación del transporte de fracción másica

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho S \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho D_S \nabla S) + q_S \quad \text{Ec. II.4}$$



### Ecuación de la densidad

$$\frac{1}{\rho} = \frac{S}{\rho_c} + \frac{1-S}{\rho_a} \quad \text{Ec. II.5}$$

## 3.7 Ecuaciones para la turbulencia

Para modelizar la turbulencia, dado que su cálculo directo está descartado debido a las altas exigencias en cuanto a la densidad de la malla, se utilizará un modelo de tipo RANS, en concreto el llamado SST k-omega. Este modelo añade ecuaciones adicionales que completan el sistema para que pueda resolverse.

## 3.8 Condiciones de contorno

Para flujos incompresibles, se aplican normalmente las siguientes condiciones de contorno (15):

- Velocidad y temperatura conocidas en las fronteras de entrada de flujo;
- Gradiente nulo en dirección perpendicular a las fronteras para todas las variables escalares y para la componente de velocidad paralela a la superficie en planos de simetría; velocidad normal a tal superficie también nula;
- Condición de adherencia en todas las superficies sólidas;
- Gradiente conocido (normalmente nulo) de todas las variables en las superficies de salida de flujo.

Adicionalmente, será necesario especificar unas condiciones iniciales en todo el dominio, no sólo en las fronteras, para poder iniciar el proceso de cálculo. Estas condiciones consisten en una serie de aproximaciones iniciales de los valores que tomaran las distintas variables a lo largo del proceso de la simulación, y no necesitan ser demasiado precisas, ya que, si bien deben elegirse con cierta cautela, no influyen en la solución final del problema.

# ANEXO III: Modelado 3D y Mallado

## 1 Obtención del modelo CAD

La finalidad de este apartado es explicar el proceso de creación del modelo 3D que representa el sistema a estudiar. Para una descripción más exhaustiva se remite al *Anexo III*.

### 1.1 Elección del software

En primer lugar, hay que mencionar que el software de cálculo utilizado va a ser *OpenFOAM*. Esto se debe a que es un software de uso libre, es decir, que permite el acceso a su código fuente, lo cual permite modificar, ampliar o crear *solvers* propios que se adapten a las necesidades del problema a resolver.

En segundo lugar, son necesarias dos etapas en la creación una malla sobre la cual realizar la simulación: la creación de un modelo 3D y el mallado de ese modelo.

Teniendo en cuenta todo lo anterior, el software elegido es *Salome*, también de uso libre. Este programa permite realizar el modelado en 3D y su posterior mallado. Además, permite registrar la malla en el formato necesario para que el software de cálculo, *OpenFOAM*, pueda interpretarla.

### 1.2 Consideraciones previas

El sistema a estudiar consiste en el volumen de aire que rodea a los edificios en una zona urbana, y va a estar representado por un gran prisma rectangular de cuya parte inferior han sido eliminados los volúmenes que ocupan los edificios. Estos huecos, además de otros condicionantes que se comentan a continuación, van a influir en gran medida en el proceso de mallado.

Para empezar, la malla ha de estar formada necesariamente por elementos hexaédricos. Esto se debe a la alta inestabilidad que existe posteriormente en la simulación si se utilizan mallas de otro tipo, como las formadas por tetraedros.

Esta situación hace del proceso de mallado algo mucho más complejo ya que, a diferencia de las mallas tetraédricas, las hexaédricas no se generan fácilmente de manera automática. La causa de este inconveniente es que el algoritmo de mallado de *Salome* requiere que la geometría del dominio a mallar con hexaedros sea también de forma hexaédrica, ya que se basa en la proyección de las mallas superficiales de caras opuestas. De esta forma, no quedará más remedio que dividir el dominio de estudio global en zonas y subdominios hexaédricos que se adapten a las necesidades de cada punto.

Esto impone ciertas simplificaciones en el modelo 3D inicial:

- Edificios lisos sin detalles
- limitación en superficies curvas y en superficies que no sean horizontales o verticales
- homogeneización de dimensiones para disminuir el número de subdivisiones

Por otra parte, en cuanto a los requerimientos de la simulación del flujo de aire, mientras que la densidad de malla en las zonas cercanas a las superficies sólidas (suelo y edificios) debe ser mayor, en las zonas más alejadas ésta puede ser más basta. Sin embargo, el estudio de un contaminante requiere que las celdas no sean demasiado grandes si se desea mantener un mínimo de detalle en la representación de su comportamiento.

Todas estas características que ha de tener el mallado condicionan a su vez el modelo 3D inicial.

#### **Dimensiones del sistema (Distancias entre edificios y fronteras):**

Indicar a qué distancia de los límites de la zona urbana deben situarse las fronteras del sistema, de tal manera que lo observado en una zona suficientemente amplia alrededor de los edificios no se vea distorsionado por la presencia de dichas fronteras.

### **1.3 Modelado del edificio o conjunto de edificios**

A partir de aquí se explicará el proceso seguido para modelar uno de los casos, concretamente el de un edificio aislado por ser el más sencillo, siendo el resto completamente análogos.

Una vez elegido el software a utilizar, *Salome* en este caso, el primer paso es modelar los edificios de la zona urbana a analizar, mientras se tienen en cuenta las consideraciones anteriormente citadas. Esto se realizará a través del módulo de trabajo llamado *Geometry*, en *Salome*.

Una de las simplificaciones a las que nos lleva la dificultad del mallado hexaédrico es que el nivel del suelo será constante y que las paredes de los edificios serán planas y paralelas o perpendiculares entre sí.

Para empezar, se dibuja la proyección en planta (en el plano XY) del edificio a partir de aristas, resultando cuadrilátero.

A continuación, se genera una cara cuadrangular rellenando el interior del grupo de cuatro aristas que se ha creado en el paso anterior.

Finalmente, se realiza una operación de extrusión en la dirección del eje Z a dicha cara, dándole la longitud según su altura deseada.

De esta manera tenemos el paralelepípedo que compone la zona urbana que vamos a analizar (Figura III.1).

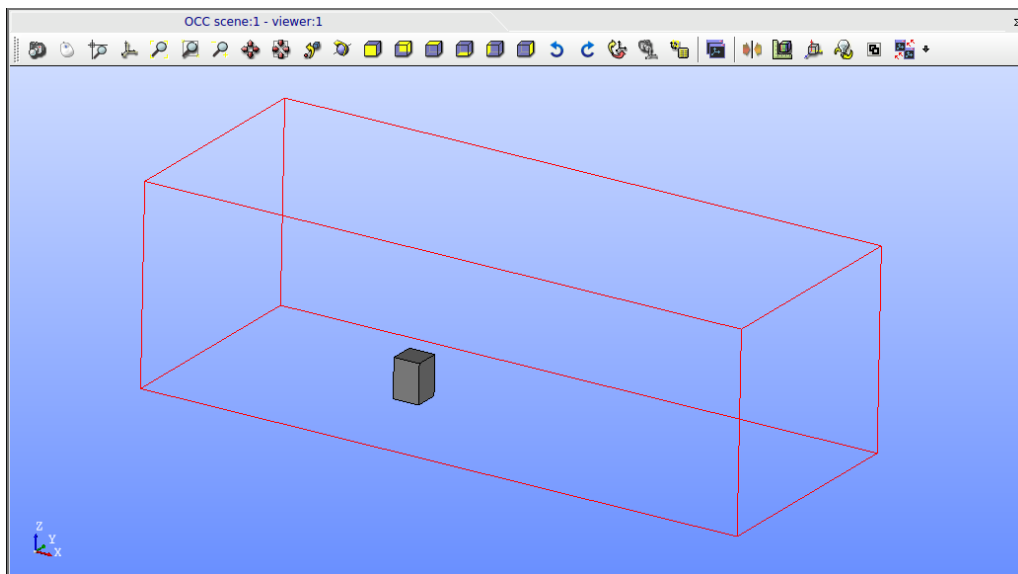


Figura III.1. Geometría del edificio

#### 1.4 Modelado de la zona inmediata a los edificios (zona interior)

Una vez generado el volumen que ocupa el edificio, el siguiente paso es obtener el volumen que ocupa el aire a su alrededor, que será lo que constituya finalmente el dominio de estudio.

Se diferencian dos zonas: una cercana al edificio y otra más alejada. Esta diferenciación es debida a los diferentes requerimientos en el mallado de cada una de ellas. Mientras que en la zona interior la malla será más fina y homogénea para calcular de forma más precisa las peculiaridades del flujo y el movimiento del contaminante, en la zona exterior podrá ser relativamente más basta.

Para crear esta zona interior inmediata al edificio, será necesario ocupar el volumen que lo rodea con bloques hexaédricos (como se ha comentado anteriormente en el apartado 1.2), asegurando posteriormente que las mallas superficiales de bloques en contacto coincidan (lo que se comenta en el apartado 2.2), de manera que el resultado sea un conjunto de paralelepípedos que formen un paralelepípedo mayor con un hueco en la parte inferior, donde se encontraría el edificio.

Este proceso resulta tanto más tedioso cuanto mayor es el número de edificios y puede llevarse a cabo a partir de diversas estrategias a la hora de dividir las zonas principales en hexaedros más pequeños. Sin embargo, la forma de distribuir el volumen de dichas zonas en piezas hexaédricas deberá estar bien planteada para facilitar posteriormente el cambio de densidad de malla entre la zona interior y la exterior.

Aun así, es aconsejable reducir el número de divisiones al mínimo para ahorrar operaciones de preparación y evitar un excesivo coste computacional posteriormente durante la generación de la malla.

En este caso, se ha considerado un volumen alrededor del edificio, de igual anchura en los laterales y de mayor extensión en la zonas anterior y posterior al edificio, siendo esta última todo lo larga posible por ir en la dirección del viento, de manera que el comportamiento del contaminante sea calculado con mayor detalle.

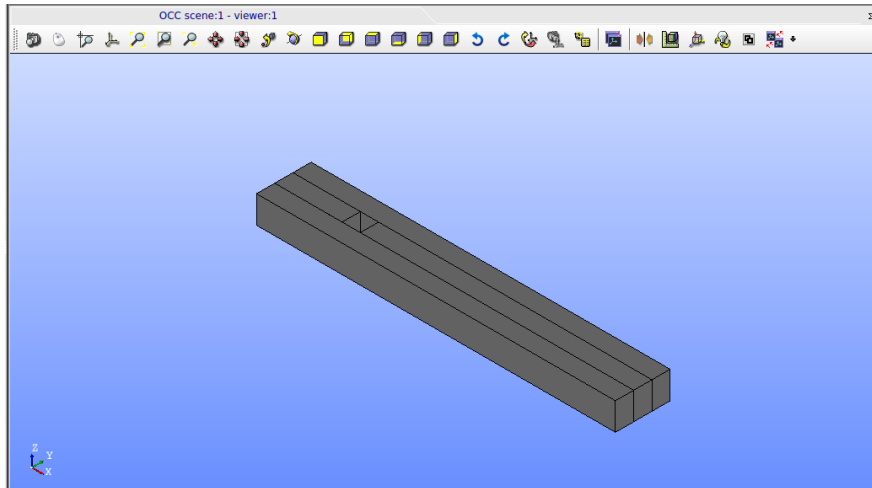


Figura III.2. Capa inferior interna de la geometría

## 1.5 Modelado de la zona exterior

La creación de la zona de aire exterior se realiza de la misma manera, a base de bloques que se proyectan desde las caras exteriores de la zona interior hacia el exterior, junto con otros que ocupen también los bordes y las esquinas.

Las dimensiones exteriores de esta zona serán tales que, durante la simulación del problema, no se produzcan perturbaciones en el flujo cercano al edificio debido a una distancia demasiado corta entre éste y las fronteras del dominio, es decir, las cuatro caras laterales más alejadas y la cara superior.

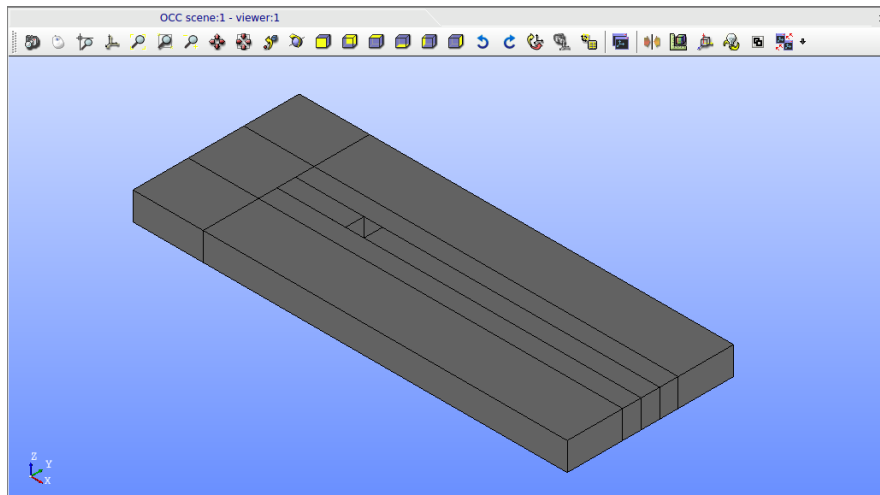


Figura III.3. Capas inferiores interna y externa de la geometría

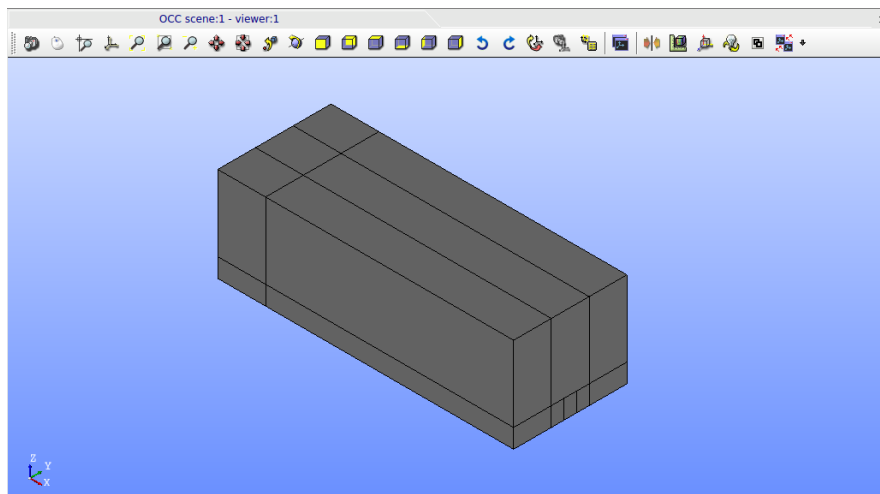


Figura III.4. Capas inferior y superior de la geometría

## 1.6 Preparación previa al mallado

En este momento se dispone de dos conjuntos de cuerpos hexaédricos, los correspondientes a la zona interior, adyacente a los edificios, y los de la zona exterior, que cubren a los de la interior.

La necesidad de generar un mallado de distinta densidad según la zona hace que se deban definir los elementos que establecerán dicha densidad durante la generación de la malla.

Esos elementos no son otros que las aristas de los bloques hexaédricos utilizados para llenar el espacio del dominio total. Se procede pues de la siguiente manera:

Las aristas de los bloques de la zona interior serán divididas más adelante en segmentos iguales según los criterios generales del mallado (explicados en el siguiente apartado), por lo que no es necesario definir nada sobre ellas ahora.

En la zona exterior, el mallado será más basto cuanto más se aleje de la zona interior, de manera que las mallas superficiales de cualquier par de bloques contacto coincida. Esto se consigue agrupando las aristas según su orientación respecto de la zona interior, resultando los siguientes grupos:

- Aristas en dirección +X
- Aristas en dirección -X
- Aristas en dirección +Y
- Aristas en dirección -Y
- Aristas en dirección +Z

Una vez definidos estos 5 grupos de aristas, bastará con elegir un criterio de discretización para cada uno de ellos a la hora de realizar el mallado, estando asegurada la coincidencia de mallas superficiales entre bloques con independencia del criterio escogido.

## 2 Proceso de mallado

En este apartado se expone el proceso de generación del mallado, partiendo para ello del modelo 3D previamente obtenido.

### 2.1 Comentarios previos

La realización de un mallado apropiado será fundamental para conseguir unos resultados correctos tras la simulación. La forma de las celdas y su distribución y densidad en cada zona del dominio determinan tanto la estabilidad del proceso de cálculo como la cantidad de detalle y precisión de los resultados.

Teniendo en cuenta esto, como se ha comentado en el apartado anterior, se realiza un mallado con elementos hexaédricos en todo el dominio de estudio. Así mismo, la zona interior, donde se encuentran los edificios y las variaciones de las variables son más bruscas, recibe un mallado más fino que la zona exterior, donde un mayor tamaño en los elementos de la malla no repercutirá en los resultados.

Es preciso mencionar que la malla como tal no estará creada hasta que se ordene la orden de *Computar (Compute)* (Figura III.5). Hasta entonces sólo estará definida.

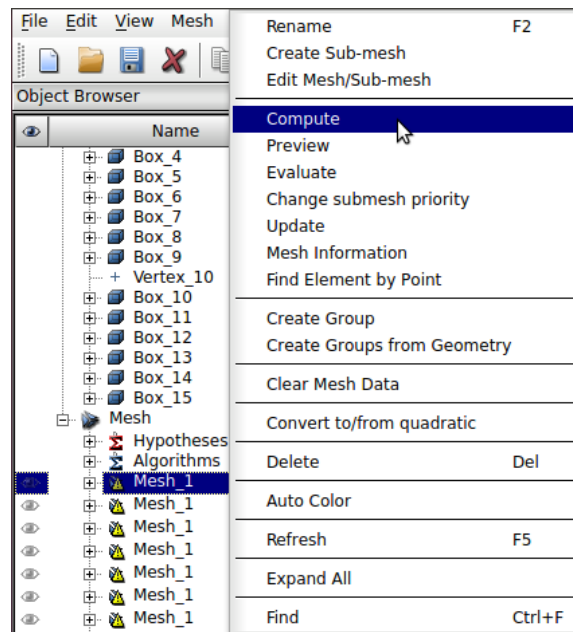


Figura III.5. Orden *compute*

## 2.2 Mallado de la zona interior

Como se ha descrito anteriormente, tanto la zona interior como la exterior han sido divididas en múltiples “subzonas” hexaédricas, las cuales, a diferencia del dominio completo, pueden mallarse con elementos hexaédricos de manera mucho más sencilla y directa.

En la zona interior, con el fin de mantener un nivel de detalle que reproduzca con una mayor precisión el comportamiento del aire más cercano a los edificios, la malla tendrá una densidad homogénea y estará formada por cubos de 2 metros de arista.

Así pues, se seleccionan todas los bloques que forman la zona interior y se realiza un mallado de estas características, seleccionando las hipótesis de mallado hexaédrico (Figura III.6) y definiendo el criterio de división de aristas en segmentos iguales de 2 m.



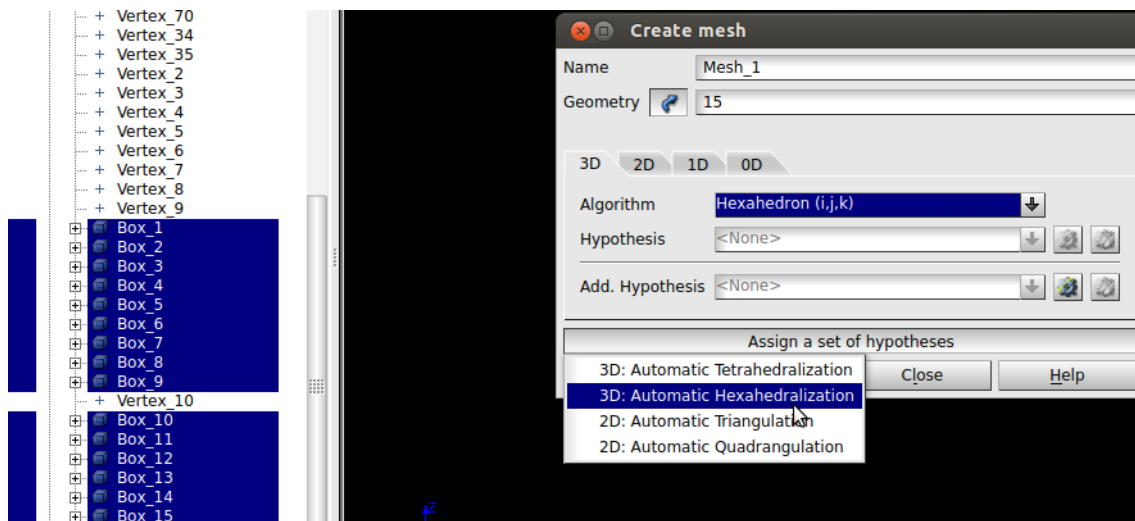


Figura III.6. Selección de hipótesis de mallado hexaédrico

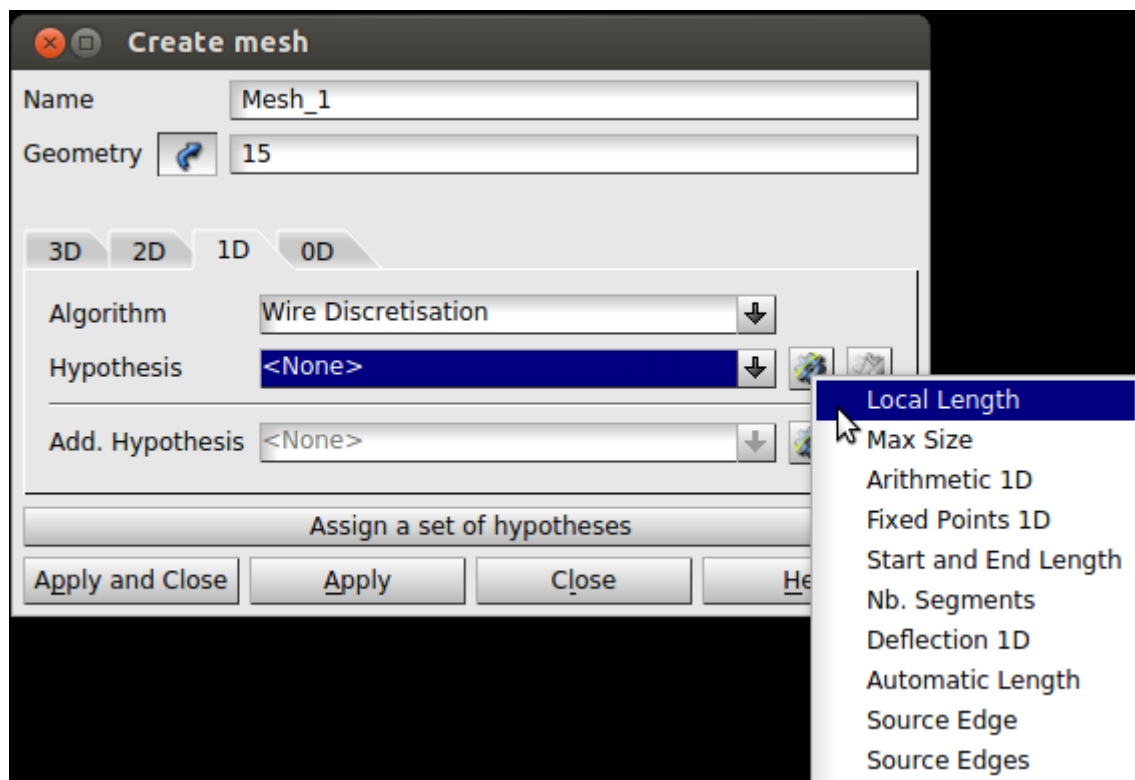


Figura III.7. Selección de hipótesis de mallado de aristas

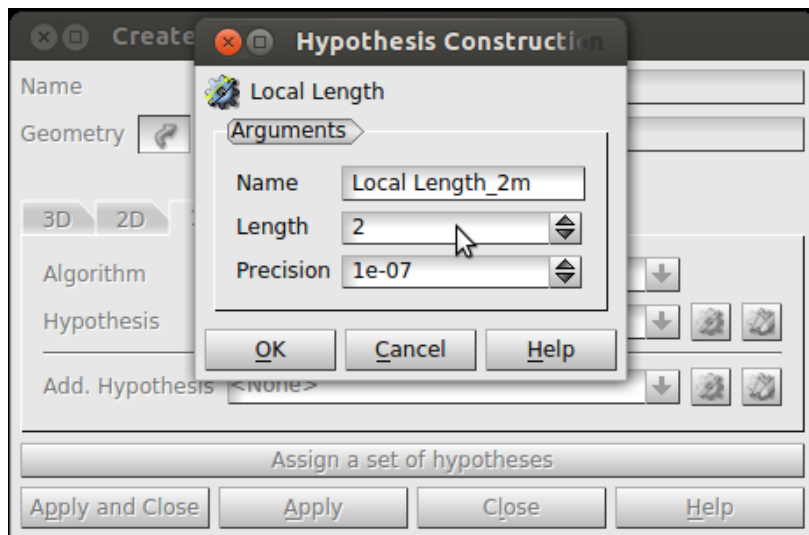


Figura III.8. Parámetros del mallado de aristas internas

Cabe comentar que, en este caso, debido a que todos los elementos de la malla son cubos idénticos de 2 metro de lado y a que el modelo 3D tenía una precisión de 2 metros, todas las mallas superficiales entre bloques coinciden sin necesidad de haber definido anteriormente un grupo que contuviera todas sus aristas, de manera que el mallado no presenta desajustes (Figuras III.7 y III.8).

El resultado será una malla hexaédrica homogénea de la zona interior, donde las separaciones entre “subzonas” resultan ahora indistinguibles. Esto se puede observar al crear la malla, mediante la orden *Compute* (Figura III.9).

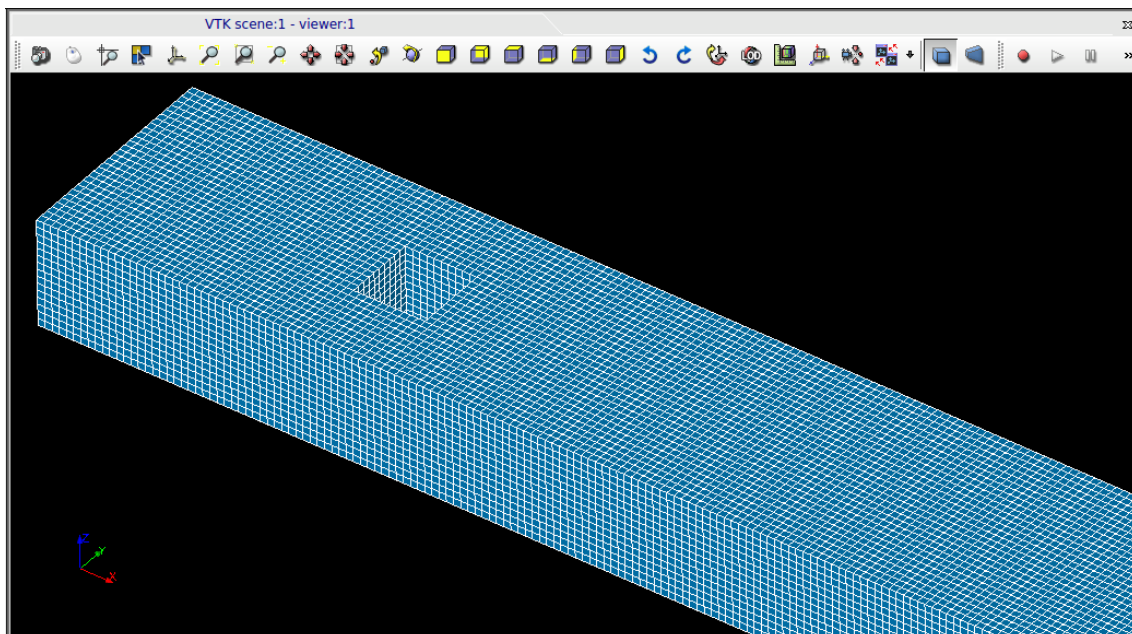


Figura III.9. Malla interna inferior generada

## 2.3 Mallado de la zona exterior

Una vez completada la malla de la zona interior, se procede a mallar la zona exterior siguiendo un procedimiento similar, aunque con algunas operaciones adicionales encaminadas a crear una malla de densidad no homogénea.

El objetivo es obtener una malla de menor densidad, es decir, que tenga elementos de mayor tamaño, en las regiones de la zona exterior más alejadas de la interior, consiguiendo así reducir posteriormente el coste computacional sin comprometer la precisión del resultado.

Para ello, se crea un mallado global de todos los bloques de la zona exterior, con unos parámetros idénticos a aquellos del mallado de la zona interior.

En este momento, si se ordenase computar la malla, la densidad de esta sería homogénea en toda su extensión, ya que los criterios generales están vigentes. Para evitar esto, es preciso aplicar hipótesis específicas de discretización a cada uno de los grupos de aristas creados anteriormente, con el objetivo de que el mallado general sea más basto en la zona más alejada del interior, aumentando su densidad de forma gradual hacia el interior, donde la malla es homogénea.

Para ello, se utiliza la opción que ofrece *Salome* de crear los llamados *submallados*, que redefinen la malla de zonas o elementos concretos donde se requieran unas características que difieran de las de la malla principal, con preferencia sobre ésta (Figura III.10).

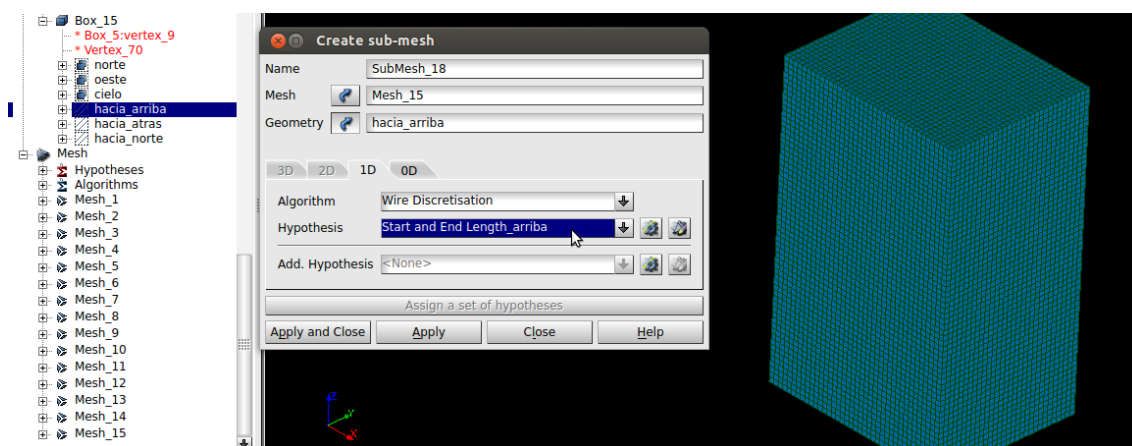


Figura III.10. Selección de hipótesis de aristas externas en submallado

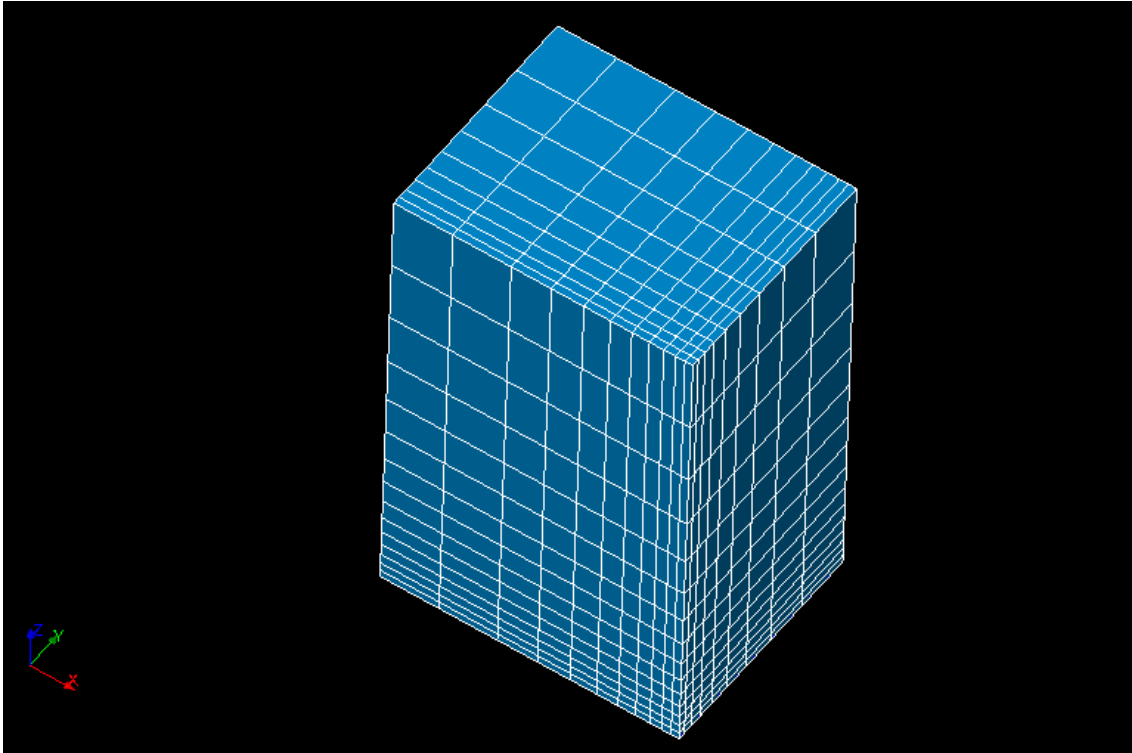


Figura III.11. Bloque de esquina superior mallado

El resultado es una malla hexaédrica de la zona exterior de densidad variable, formada por capas de hexaedros que aumentan su tamaño desde el interior hacia fuera (Figura III.11), y que encaja sobre la malla de la zona interior coincidiendo de manera exacta en su superficie celda a celda.

## 2.4 Unión y resultado final

Como último paso en el proceso de construcción de la malla completa, se generan todas las mallas de cada “subzona” individual (mediante la orden *Compute*) y se realiza la unión de todas ellas (mediante la orden *Build Compound*). La malla final se puede ver en la Figura III.12.

Finalmente, antes de exportar el mallado y proceder a los cálculos, es necesario crear una serie de *grupos* que correspondan con cada una de las superficies (o conjuntos de ellas) exteriores de la malla terminada. Esto es necesario para poder identificarlos posteriormente y aplicar sobre ellos las condiciones de contorno durante la simulación. Reciben el nombre de *patches*. Éstas serán:

- Superficie exterior en dirección +X: recibe el nombre de *este*, y desempeñará normalmente la función de *salida* del flujo (Figura III.13);
- Superficie exterior en dirección -X: recibe el nombre de *oeste*, y desempeñará normalmente la función de *entrada* del flujo;
- Superficie exterior en dirección +Y: recibe el nombre de *norte*,
- Superficie exterior en dirección -Y: recibe el nombre de *sur*,
- Superficie exterior en dirección +Z: recibe el nombre de *cielo*,

- Superficies sólidas: se trata de las superficies que representa al suelo y a los edificios), y son las únicas a través de las cuales no circula flujo. No es necesario definir las en un grupo, pues se hará automáticamente al exportar la malla a *OpenFOAM*.
- Superficies de entrada del contaminante: son pequeños grupos de celdas que forman parte de las superficies sólidas, pero que se seleccionan y definen como grupos individuales para poder asignarles las condiciones de contorno de entrada del contaminante. Reciben el nombre de *e\_chimenea* y *e\_suelo* en este caso (Figura III.14).

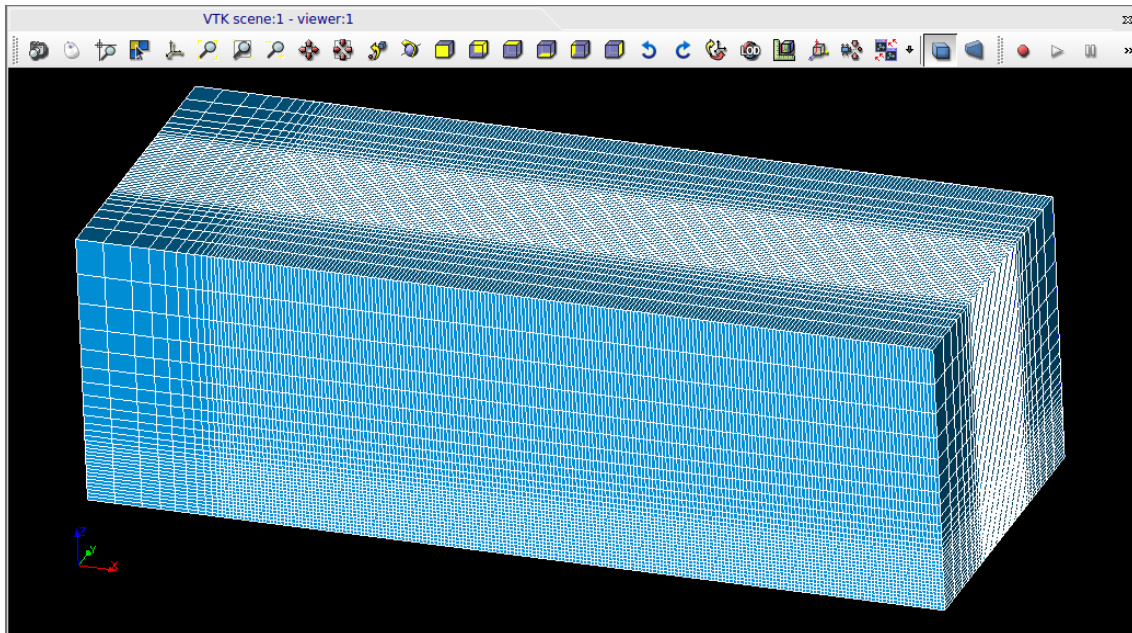


Figura III.12. Malla total generada

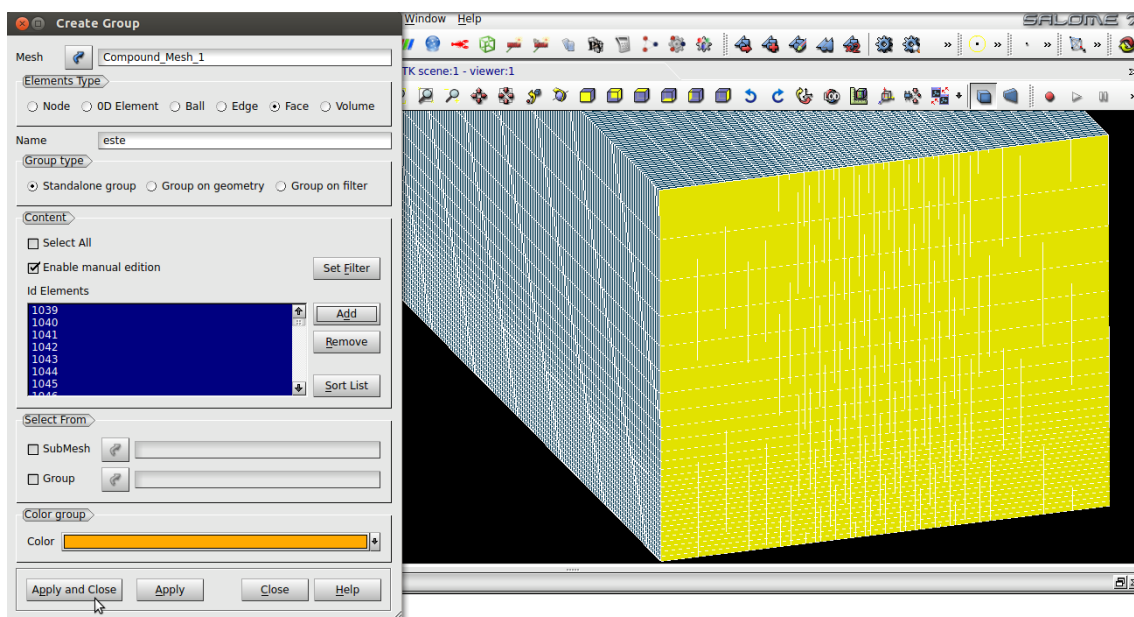


Figura III.13. Selección de celdas para formar un *patch*

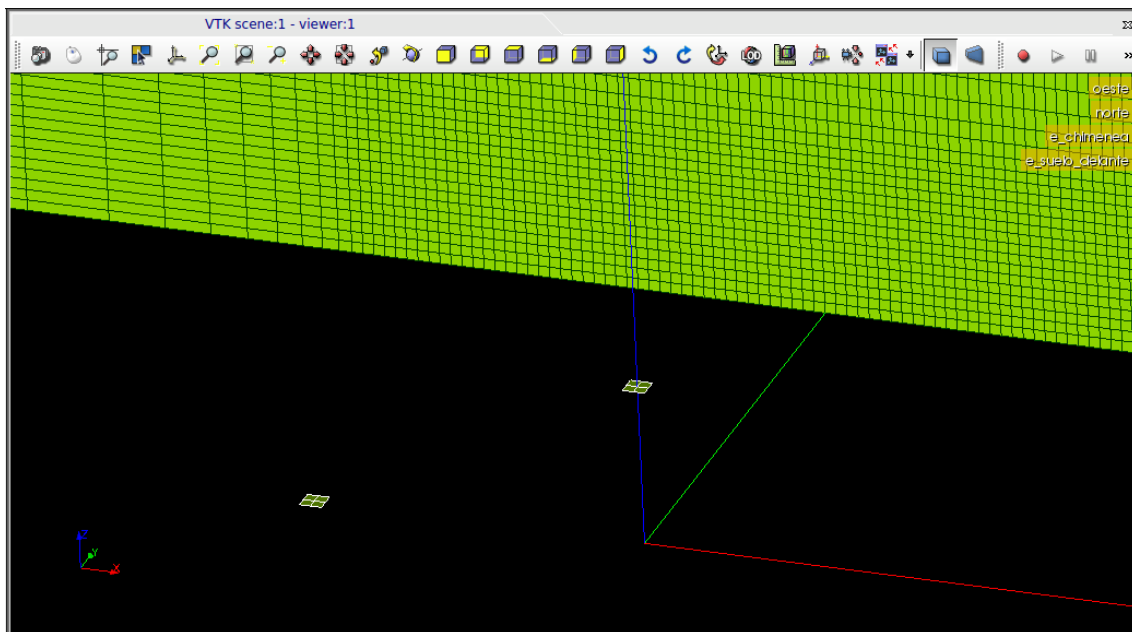


Figura III.14. *Patches* de las fuentes del suelo y de chimenea, con el *patch* norte al fondo

# ANEXO IV: Código del *solver* y ficheros

## 1 El *solver*

El *solver* contiene el algoritmo de resolución del modelo matemático del problema. Está compuesto por un fichero principal, *myRhoScalarPimpleFoam.C*, y otros secundarios a los que el primero hace referencia. Estos ficheros contienen pedazos de algoritmo que resuelven un aspecto concreto dentro de la simulación.

El fichero principal hace también referencia a otros ficheros de la biblioteca general de OpenFOAM, que no se incluyen en este texto por ser de uso general de muchos otros *solvers*. Se muestran a continuación simplemente los ficheros creados o modificados específicamente para resolver el tipo de problemas planteado en este proyecto.

### 1.1 Fichero *myRhoScalarPimpleFoam.C*

```
#include "fvCFD.H"
#include "basicPsiThermo.H"
#include "turbulenceModel.H"
#include "bound.H"
#include "pimpleControl.H"

// * * * * *

int main(int argc, char *argv[])
{
    #include "setRootCase.H"
    #include "createTime.H"
    #include "createMesh.H"

    pimpleControl pimple(mesh);

    #include "createFields.H"
    #include "initContinuityErrs.H"

    // * * * * *

    Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

    while (runTime.run())
    {
        #include "readTimeControls.H"
        #include "compressibleCourantNo.H"
        #include "setDeltaT.H"

        runTime++;

        Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
```

```

#include "rhoEqn.H"

// --- Pressure-velocity PIMPLE corrector loop
while (pimple.loop())
{
    #include "UEqn.H"

    //skip energy eq.
    // #include "hEqn.H"

    // --- Pressure corrector loop
    while (pimple.correct())
    {
        #include "pEqn.H"
    }

    if (pimple.turbCorr())
    {
        turbulence->correct();
    }

    #include "SEqn.H"
}

runTime.write();

Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() <<
" s"
    << " clockTime = " << runTime.elapsedClockTime() <<
" s"
    << nl << endl;
}

Info<< "End\n" << endl;

return 0;
}

// * * * * *

```

## 1.2 Fichero createFields.H

```

Info<< "Reading thermophysical properties\n" << endl;

autoPtr<basicPsiThermo> pThermo
(
    basicPsiThermo::New(mesh)
);
basicPsiThermo& thermo = pThermo();

// skip the next
// volScalarField& p = thermo.p();
volScalarField& h = thermo.h();
const volScalarField& psi = thermo.psi();

```



```

Info<< "Reading transportProperties\n" << endl;
    IOdictionary transportProperties
    (
        IOobject
        (
            "transportProperties",
            runTime.constant(),
            mesh,
            IOobject::MUST_READ_IF_MODIFIED,
            IOobject::NO_WRITE
        )
    );
Info<< "Reading air density rhoA\n" << endl;
dimensionedScalar rhoA
(
    transportProperties.lookup("rhoA")
);
Info<< "Reading scalar density rhoC\n" << endl;
dimensionedScalar rhoC
(
    transportProperties.lookup("rhoC")
);
Info<< "Reading diffusivity DS\n" << endl;
dimensionedScalar DS
(
    transportProperties.lookup("DS")
);

//escalar S
Info<< "Reading field S\n" << endl;
volScalarField S
(
    IOobject
    (
        "S",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);
Info<< "Initialising field rho\n" << endl;
volScalarField rho
(
    IOobject
    (
        "rho",
        runTime.timeName(),
        mesh,

```

```

        IOobject::READ_IF_PRESENT,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    1./((S/rhoC + (1.-S)/rhoA)
);

Info<< "Reading field p\n" << endl;
volScalarField p
(
    IOobject
    (
        "p",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

Info<< "Reading field U\n" << endl;
volVectorField U
(
    IOobject
    (
        "U",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

#include "compressibleCreatePhi.H"

dimensionedScalar rhoMax(pimple.dict().lookup("rhoMax"));
dimensionedScalar rhoMin(pimple.dict().lookup("rhoMin"));

Info<< "Creating turbulence model\n" << endl;
autoPtr<compressible::turbulenceModel> turbulence
(
    compressible::turbulenceModel::New
    (
        rho,
        U,
        phi,
        thermo
    )
);

Info<< "Creating field dpdt\n" << endl;
volScalarField dpdt("dpdt", fvc::ddt(p));

Info<< "Creating field kinetic energy K\n" << endl;
volScalarField K("K", 0.5*magSqr(U));

```

### 1.3 Fichero *UEqn.H*

```
// Solve the Momentum equation
tmp<fvVectorMatrix> UEqn
(
    fvm::ddt(rho, U)
    + fvm::div(phi, U)
    + turbulence->divDevRhoReff(U)
);
UEqn().relax();
volScalarField rAU(1.0/UEqn().A());
if (pimple.momentumPredictor())
{
    solve(UEqn() == -fvc::grad(p));
    K = 0.5*magSqr(U);
}
```

### 1.4 Fichero *pEqn.H*

```
//rho = thermo.rho();
rho=1./(S/rhoC + (1.-S)/rhoA);
rho = max(rho, rhoMin);
rho = min(rho, rhoMax);
rho.relax();

U = rAU*UEqn().H();
if (pimple.nCorrPISO() <= 1)
{
    UEqn.clear();
}
if (pimple.transonic())
{
    surfaceScalarField phid
    (
        "phid",
        fvc::interpolate(psi)
        *(
            (fvc::interpolate(U) & mesh.Sf())
            + fvc::ddtPhiCorr(rAU, rho, U, phi)
        )
    );
    while (pimple.correctNonOrthogonal())
    {
        fvScalarMatrix pEqn
        (
```

```

        fvm::ddt(psi, p)
        + fvm::div(phiid, p)
        - fvm::laplacian(rho*rAU, p)
    );

    pEqn.solve(mesh.solver(p.select(pimple.finalInnerIter())));

    if (pimple.finalNonOrthogonalIter())
    {
        phi == pEqn.flux();
    }
}
else
{
    phi =
        fvc::interpolate(rho)*
        (
            (fvc::interpolate(U) & mesh.Sf())
            + fvc::ddtPhiCorr(rAU, rho, U, phi)
        );

    while (pimple.correctNonOrthogonal())
    {
        // Pressure corrector
        fvScalarMatrix pEqn
        (
            fvm::ddt(psi, p)
            + fvc::div(phi)
            - fvm::laplacian(rho*rAU, p)
        );

        pEqn.solve(mesh.solver(p.select(pimple.finalInnerIter())));

        if (pimple.finalNonOrthogonalIter())
        {
            phi += pEqn.flux();
        }
    }

    #include "rhoEqn.H"
    #include "compressibleContinuityErrs.H"

    // Explicitly relax pressure for momentum corrector
    p.relax();

    // Recalculate density from the relaxed pressure
    //rho = thermo.rho();

    rho=1./(S/rhoC + (1.-S)/rhoA);

    rho = max(rho, rhoMin);
    rho = min(rho, rhoMax);
    rho.relax();
    Info<< "rho max/min : " << max(rho).value()
        << " " << min(rho).value() << endl;

    U -= rAU*fvc::grad(p);
    U.correctBoundaryConditions();

```

```
K = 0.5*magSqr(U);
dpdt = fvc::ddt(p);
```

## 1.5 Fichero *SEqn.H*

```
{
    fvScalarMatrix SEqn
    (
        fvm::ddt(rho, S)
        + fvm::div(phi, S)
        - fvm::laplacian(rho*DS, S)
    );

    SEqn.relax();
    SEqn.solve();
}
```

## 2 Archivos de caso

Como se explica en el apartado 4.3.3 de la memoria, los archivos de un caso típico de OpenFOAM se estructuran como se muestra en la Figura IV.1.

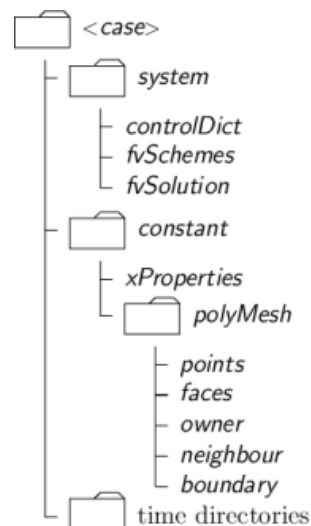


Figura IV.1. Estructura de ficheros de un caso de OpenFOAM.

A continuación se muestran como ejemplo los ficheros de uno de los casos simulados en este proyecto, y que es análogo a cualquiera de los demás casos, con algunas diferencias en valores de condiciones de contorno y de propiedades físicas del contaminante, entre otras.

## 2.1 Directorio *system*

En este directorio se encuentran, en el fichero *controlDict*, los parámetros de control de la simulación; en el fichero *fvSchemes*, los métodos de discretización de los elementos de las ecuaciones del modelo; y, en el fichero *fvSolution*, entre otros parámetros, las tolerancias y criterios de convergencia de cada variable.

### 2.1.1 Fichero *controlDict*

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       controlDict;
}
// * * * * *

application      rhoPimpleFoam;
startFrom        latestTime;
startTime        0;
stopAt           endTime;
endTime          602;
deltaT           0.1;
writeControl      runtime;
writeInterval     30;
purgeWrite        0;
writeFormat       binary;
writePrecision    10;
writeCompression off;
timeFormat        general;
timePrecision     6;
runtimeModifiable true;
adjustTimeStep    no;
maxCo             0.3;
```

```

maxDeltaT      0.01;

libs ("libmyCompressibleAtmBoundaryLayerInletVelocity.so");

functions
{
    probes
    {
        // where to load it from
        functionObjectLibs ( "libsampling.so" );

        type                probes;

        // Name of the directory for probe data
        name                probes;

        // write at same frequency as fields
        outputControl        outputTime;//outputTime//timeStep
        outputInterval    1;//when timeStep

        // Fields to be probed
        fields
        (
            s rho u
        );

        probeLocations
        (
            ( -3 43 1 ) // en e_suelo_detras (a 1 m de altura)
            ( -16 18 2 ) // salida interior norOeste
            ( -16 -16 2 ) // salida interior surOeste
            ( 16 18 2 ) // salida interior norEste
            ( 16 -16 2 ) // salida interior surEste
            ( -47 -47 2 ) // salida emergencia Oeste
            ( 47 -47 2 ) // salida emergencia Este
            ( -14 -53 2 ) // Puerta principal Oeste
            ( 14 -53 2 ) // Puerta principal Este
        );
    }
}

// * * * * *

```

## 2.1.2 Fichero fvSchemes

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSchemes;
}

// * * * * *

ddtSchemes
{

```

```

    default      Euler;
}

gradSchemes
{
    default      Gauss linear;
    grad(p)      Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default      none;
    div(phi,U)   Gauss limitedLinearV 1;
    div(phi,d,p) Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,k)   Gauss linear;
    div(phi,h)   Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,k)   Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,epsilon) Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,R)   Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,omega) Gauss limitedLinear 1;
    div((rho*R)) Gauss linear;
    div(R)        Gauss linear;
    div(U)         Gauss linear;
    div((muEff*dev2(T(grad(U)))))) Gauss linear;
    div(phi,S)     Gauss limitedLinear 1;
}

laplacianSchemes
{
    default      none;
    laplacian(muEff,U) Gauss linear corrected;
    laplacian(mut,U) Gauss linear corrected;
    laplacian(DkEff,k) Gauss linear corrected;
    laplacian(DepsilonEff,epsilon) Gauss linear corrected;
    laplacian(DREff,R) Gauss linear corrected;
    laplacian(DomegaEff,omega) Gauss linear corrected;
    laplacian((rho*(1/A(U))),p) Gauss linear corrected;
    laplacian(alphaEff,h) Gauss linear corrected;
    laplacian((rho*DS),S) Gauss linear corrected;

    laplacian(1,p) Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
    default      linear;
}

snGradSchemes
{
    default      corrected;
}

fluxRequired
{
    default      no;
    p            ;
}

// * * * * *

```



### 2.1.3 Fichero fvSolution

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format        ascii;
    class         dictionary;
    location      "system";
    object        fvSolution;
}
// * * * * *

solvers
{
    p
    {
        solver          PCG;
        preconditioner   DIC;
        tolerance        1e-06;
        relTol           0.01;
    }

    pFinal
    {
        $p;
        relTol           0;
    }

    "rho.*"
    {
        $p;
        tolerance        1e-05;
        relTol           0;
    }

    "(U|h|R|k|epsilon|omega|S)"
    {
        solver          PBiCG;
        preconditioner   DILU;
        tolerance        1e-05;
        relTol           0.1;
    }

    "(U|h|R|k|epsilon|omega|S)Final"
    {
        $U;
        relTol           0;
    }
}

PIMPLE
{
    momentumPredictor yes;
    nOuterCorrectors 1;
    nCorrectors 2;
    nNonOrthogonalCorrectors 0;
    rhoMin          rhoMin [ 1 -3 0 0 0 ] 0.1;
    rhoMax          rhoMax [ 1 -3 0 0 0 ] 4.0;
}
```

```

}

potentialFlow
{
    nNonOrthogonalCorrectors 3;
}

// * * * * *

```

## 2.2 Directorio *constant*

En él se encuentran datos sobre el mallado y las propiedades físicas del modelo, como los valores de las constantes de las ecuaciones y el tipo de aproximación de turbulencia seleccionado.

### 2.2.1 Fichero `transportProperties`

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "constant";
    object       transportProperties;
}
// * * * * *

transportModel  Newtonian;

nu              nu [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 1e-05;
DS              DS [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 0.00001;

rhoA            rhoA [ 1 -3 0 0 0 0 0 ] 1.17;//aire
rhoC            rhoC [ 1 -3 0 0 0 0 0 ] 0.1785;//helio
CrossPowerLawCoeffs
{
    nu0          nu0 [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 1e-06;
    nuInf        nuInf [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 1e-06;
    m            m [ 0 0 1 0 0 0 0 ] 1;
    n            n [ 0 0 0 0 0 0 0 ] 1;
}

BirdCarreauCoeffs
{
    nu0          nu0 [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 1e-06;
    nuInf        nuInf [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 1e-06;
    k            k [ 0 0 1 0 0 0 0 ] 0;
    n            n [ 0 0 0 0 0 0 0 ] 1;
}

```



```
// * * * * *
simulationType RASModel;
// * * * * *
```

## 2.2.4 Fichero RASProperties

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "constant";
    object       RASProperties;
}
// * * * * *

RASModel      kOmegaSST;

turbulence     on;

printCoeffs    on;

// * * * * *
```

## 2.2.5 Directorio *polyMesh*

Todo el contenido de este directorio se genera automáticamente al importar a *OpenFOAM* la malla creada en *Salome*.

Lo único que hay que modificar tras su creación es el fichero *boundary*, donde se especifica el tipo básico de frontera de cada *patch*, quedando de la siguiente manera.

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       binary;
    class        polyBoundaryMesh;
    location     "constant/polyMesh";
    object       boundary;
}
// * * * * *

9
(
    e_suelo_detras
```

```

    {
        type          wall;
        nFaces        6;
        startFace     540270;
    }
    e_chimenea_1
    {
        type          wall;
        nFaces        1;
        startFace     540276;
    }
    e_chimenea_y2
    {
        type          wall;
        nFaces        3;
        startFace     540277;
    }
    cielo
    {
        type          patch;
        nFaces        12084;
        startFace     540280;
    }
    norte
    {
        type          patch;
        nFaces        1938;
        startFace     552364;
    }
    sur
    {
        type          patch;
        nFaces        1938;
        startFace     554302;
    }
    este
    {
        type          patch;
        nFaces        1802;
        startFace     556240;
    }
    oeste
    {
        type          patch;
        nFaces        1802;
        startFace     558042;
    }
    defaultFaces
    {
        type          wall;
        nFaces        16774;
        startFace     559844;
    }
)
// * * * * *

```

## 2.3 Directorios temporales

Éstos se crean de manera automática conforme avanza la simulación, según los parámetros definidos en el fichero *controlDict*. La única excepción es el directorio *0*, correspondiente al instante inicial, y que contiene las condiciones iniciales y de contorno de todas las variables que utiliza el modelo numérico.

El contenido de los ficheros de dicho directorio se muestra en los siguientes apartados.

### 2.3.1 Variable *U*

```
// * * * * *
dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];
internalField    uniform (0 0 0);
boundaryField
{
    #include "include/ABLConditions"

    cielo
    {
        type          zeroGradient;
    }

    norte
    {
        type
myCompressibleAtmBoundaryLayerInletVelocity;
        Uref          $Uref;
        Href          $Href;
        n              $windDirection;
        z              $zDirection;
        z0             $z0;
        value          $internalField;
        zGround        $zGround;
    }

    oeste
    {
        type
myCompressibleAtmBoundaryLayerInletVelocity;
        Uref          $Uref;
        Href          $Href;
        n              $windDirection;
        z              $zDirection;
        z0             $z0;
        value          $internalField;
        zGround        $zGround;
    }

    sur
```

```

{
    type          zeroGradient;
}

este
{
    type          zeroGradient;
}

defaultFaces//ciudad(edificios)
{
    type          fixedValue;
    value         uniform (0 0 0);
}

e_chimenea_1
{
    type          fixedValue;
    value         uniform (0 0 0);
}
e_chimenea_y2
{
    type          fixedValue;
    value         uniform (0 0 0);
}

e_suelo_detras
{
    type          fixedValue;
    value         uniform (0 0 0);
}

}

// * * * * *

```

### 2.3.2 Variable *rho*

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       binary;
    class        volScalarField;
    location     "1";
    object       rho;
}
// * * * * *

dimensions      [1 -3 0 0 0 0 0];
internalField    uniform 1.17 ;
boundaryField
{
    cielo

```

```

    {
        type            zeroGradient;
    }

    norte
    {
        type            zeroGradient;
    }

    sur
    {
        type            zeroGradient;
    }

    oeste
    {
        type            zeroGradient;
    }

    este
    {
        type            zeroGradient;
    }

    defaultFaces//ciudad(edificios)
    {
        type            zeroGradient;
    }

    "e_chimenea.*"
    {
        type            zeroGradient;
    }

    e_suelo_detras
    {
        type            zeroGradient;
    }
}

// * * * * *

```

### 2.3.3 Variable S

```

FoamFile
{
    version            2.0;
    format              ascii;
    class               volScalarField;
    object              T;
}
// * * * * *

dimensions            [0 0 0 0 0 0 0];

```



```

internalField    uniform 0;
boundaryField
{
    cielo
    {
        type            zeroGradient;
    }

    norte
    {
        type            zeroGradient;
    }

    sur
    {
        type            zeroGradient;
    }

    oeste
    {
        type            zeroGradient;
    }

    este
    {
        type            zeroGradient;
    }

    defaultFaces// suelo y edificios
    {
        type            zeroGradient;
    }

    e_suelo_detras
    {
        type            zeroGradient;
//      type            fixedValue;
//      value            uniform 0;
    }

    e_chimenea_1
    {
        type            zeroGradient;
//      type            fixedValue;
//      value            uniform 0;
    }

    e_chimenea_y2
    {
        type            zeroGradient;
//      type            fixedValue;
//      value            uniform 0;
    }

}

// * * * * *

```

### 2.3.4 Variable $p$

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    object       p;
}
// * * * * *

dimensions      [1 -1 -2 0 0 0 0];
internalField   uniform 0;//100000
boundaryField
{
    cielo
    {
        type          zeroGradient;
    }

    norte
    {
        type          zeroGradient;
    }

    sur
    {
        type          fixedValue;
        value         uniform 0;
    }

    oeste
    {
        type          zeroGradient;
    }

    este
    {
        type          fixedValue;
        value         uniform 0;
    }

    defaultFaces//ciudad(edificios)
    {
        type          zeroGradient;
    }

    "e_chimenea.*"
    {
        type          zeroGradient;
    }

    e_suelo_detras
    {
        type          zeroGradient;
    }
}
```

```

}
// * * * * *

```

### 2.3.5 Variable *T*

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    object       T;
}
// * * * * *
dimensions      [0 0 0 1 0 0 0];
internalField    uniform 300;
boundaryField
{
    cielo
    {
        type      zeroGradient;
    }
    norte
    {
        type      zeroGradient;
    }
    sur
    {
        type      zeroGradient;
    }
    oeste
    {
        type      zeroGradient;
    }
    este
    {
        type      zeroGradient;
    }
    defaultFaces//ciudad(edificios)
    {
        type      zeroGradient;
    }
    "e_chimenea.*"
    {
        type      zeroGradient;
    }
}

```

```

    }

    e_suelo_detras
    {
        type                zeroGradient;
    }

}

// * * * * *

```

### 2.3.6 Variable *R*

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volSymmTensorField;
    location     "0";
    object       R;
}
// * * * * *

dimensions      [ 0 2 -2 0 0 0 0 ];
internalField    uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
boundaryField
{
    oeste
    {
        type                compressible::kqRWallFunction;
        value                uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
    }

    cielo
    {
        type                kqRWallFunction;
        value                uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
    }

    norte
    {
        type                kqRWallFunction;
        value                uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
    }

    sur
    {
        type                kqRWallFunction;
        value                uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
    }
}

```

```

este
{
    type          kqRWallFunction;
    value         uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
}

defaultFaces//ciudad(edificios)
{
    type          kqRWallFunction;
    value         uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
}

"e_chimenea.*"
{
    type          kqRWallFunction;
    value         uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
}

e_suelo_detras
{
    type          kqRWallFunction;
    value         uniform ( 0 0 0 0 0 0 );
}

}

// * * * * *

```

### 2.3.7 Variable $k$

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       k;
}
// * * * * *

dimensions      [ 0 2 -2 0 0 0 0 ];
internalField   uniform 0.00325;
boundaryField
{
    oeste
    {
        type          turbulentIntensityKineticEnergyInlet;
        intensity     0.05;          // 5% turbulent intensity
        value         $internalField;
    }
}

```

```

    }

    cielo
    {
        type          inletOutlet;
        inletValue     $internalField;
    }

    norte
    {
        type          inletOutlet;
        inletValue     $internalField;
    }

    sur
    {
        type          inletOutlet;
        inletValue     $internalField;
    }

    este
    {
        type          inletOutlet;
        inletValue     $internalField;
    }

    defaultFaces//ciudad(edificios)
    {
        type          compressible::kqRWallFunction;
        value          uniform 0.00325;
    }

    "e_chimenea.*"
    {
        type          compressible::kqRWallFunction;
        value          uniform 0.00325;
    }

    e_suelo_detras
    {
        type          compressible::kqRWallFunction;
        value          uniform 0.00325;
    }
}

// * * * * *

```

### 2.3.8 Variable *epsilon*

```

FoamFile
{
    version          2.0;

```



```

    }

    e_suelo_detras
    {
        type            compressible::epsilonWallFunction;
        value            uniform 0;
    }
}

// * * * * *

```

### 2.3.9 Variable *omega*

```

FoamFile
{
    version            2.0;
    format              ascii;
    class               volScalarField;
    location            "0";
    object              omega;
}
// * * * * *

dimensions            [0 0 -1 0 0 0 0];
internalField          uniform 2.6;
boundaryField
{
    oeste
    {
        type            fixedValue;
        value            uniform 2.6;
    }

    cielo
    {
        type            zeroGradient;
    }

    norte
    {
        type            zeroGradient;
    }

    sur
    {
        type            zeroGradient;
    }

    este
    {

```



```

        type                zeroGradient;
    }

    defaultFaces//ciudad(edificios)
    {
        type                compressible::omegawallFunction;
        Cmu                 0.09;
        kappa               0.41;
        E                   9.8;
        value               uniform 2.6;
    }

    "e_chimenea.*"
    {
        type                compressible::omegawallFunction;
        Cmu                 0.09;
        kappa               0.41;
        E                   9.8;
        value               uniform 2.6;
    }

    e_suelo_detras
    {
        type                compressible::omegawallFunction;
        Cmu                 0.09;
        kappa               0.41;
        E                   9.8;
        value               uniform 2.6;
    }

}

// * * * * *

```

### 2.3.10 Variable *alphat*

```

FoamFile
{
    version                2.0;
    format                 ascii;
    class                  volScalarField;
    location               "0";
    object                 alphat;
}
// * * * * *

dimensions                [1 -1 -1 0 0 0 0];
internalField             uniform 0;
boundaryField
{

```

```

oeste
{
    type          alphasWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}

cielo
{
    type          alphasWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}

norte
{
    type          alphasWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}

sur
{
    type          alphasWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}

este
{
    type          alphasWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}

defaultFaces//ciudad(edificios)
{
    type          alphasWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}

"e_chimenea.*"
{
    type          alphasWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}

e_suelo_detras
{
    type          alphasWallFunction;
    Prt           0.85;
    value         uniform 0;
}
}

```



```

este
{
    type            mutkwallFunction;
    Cmu             0.09;
    kappa          0.41;
    E              9.8;
    value          uniform 0;
}

defaultFaces//ciudad(edificios)
{
    type            mutkwallFunction;
    Cmu             0.09;
    kappa          0.41;
    E              9.8;
    value          uniform 0;
}

"e_chimenea.*"
{
    type            mutkwallFunction;
    Cmu             0.09;
    kappa          0.41;
    E              9.8;
    value          uniform 0;
}

e_suelo_detras
{
    type            mutkwallFunction;
    Cmu             0.09;
    kappa          0.41;
    E              9.8;
    value          uniform 0;
}

}

// * * * * *

```

### 2.3.12 Variable *nut*

```

FoamFile
{
    version        2.0;
    format         ascii;
    class          volScalarField;
    location       "0";
    object         nut;
}

// * * * * *

dimensions       [ 0 2 -1 0 0 0 0 ];
internalField    uniform 0;

```

```

boundaryField
{
    oeste
    {
        type            calculated;
        value            uniform 0;
    }

    cielo
    {
        type            calculated;
    }

    norte
    {
        type            calculated;
    }

    sur
    {
        type            calculated;
    }

    este
    {
        type            calculated;
    }

    defaultFaces//ciudad(edificios)
    {
        type            nutkwallFunction;
        Cmu              0.09;
        kappa            0.41;
        E                9.8;
        value            uniform 0;
    }

    "e_chimenea.*"
    {
        type            mutkwallFunction;
        Cmu              0.09;
        kappa            0.41;
        E                9.8;
        value            uniform 0;
    }

    e_suelo_detras
    {
        type            mutkwallFunction;
        Cmu              0.09;
        kappa            0.41;
        E                9.8;
        value            uniform 0;
    }
}

// * * * * *

```

### 2.3.13 Variable *nuTilda*

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    object       nuTilda;
}
// * * * * *

dimensions      [0 2 -1 0 0 0 0];
internalField   uniform 0;
boundaryField
{
    oeste
    {
        type          zeroGradient;
    }
    cielo
    {
        type          zeroGradient;
    }
    norte
    {
        type          zeroGradient;
    }
    sur
    {
        type          zeroGradient;
    }
    este
    {
        type          zeroGradient;
    }
    defaultFaces//ciudad(edificios)
    {
        type          zeroGradient;
    }
    "e_chimenea.*"
    {
        type          zeroGradient;
    }
    e_suelo_detras
    {

```

```

    type          zeroGradient;
}

}

// * * * * *

```

### 2.3.14 Directorio *include*, fichero *ABLConditions*

Se trata del fichero que contiene los parámetros asociados a la condición de contorno de velocidad de los *patches* de entrada.

```

Uref          8.33;//=30 km/h
Href          100;
z0            uniform 0.1;
//turbulentKE 1.3;
windDirection (1 -1 0);// del NO hacia el SE
zDirection    (0 0 1);
zGround       uniform 0;
// * * * * *

```

## **ANEXO V: Resultados**

En este anexo se incluyen todos los resultados de las simulaciones que han sido omitidos en la memoria por cuestión de espacio. Incluye los ensayos sobre la influencia de la densidad y toda la serie de simulaciones en función de la velocidad del viento y de su dirección en el escenario del edificio Torres Quevedo.



# 1 Análisis de la influencia de la densidad

## 1) Evolución del penacho con el tiempo

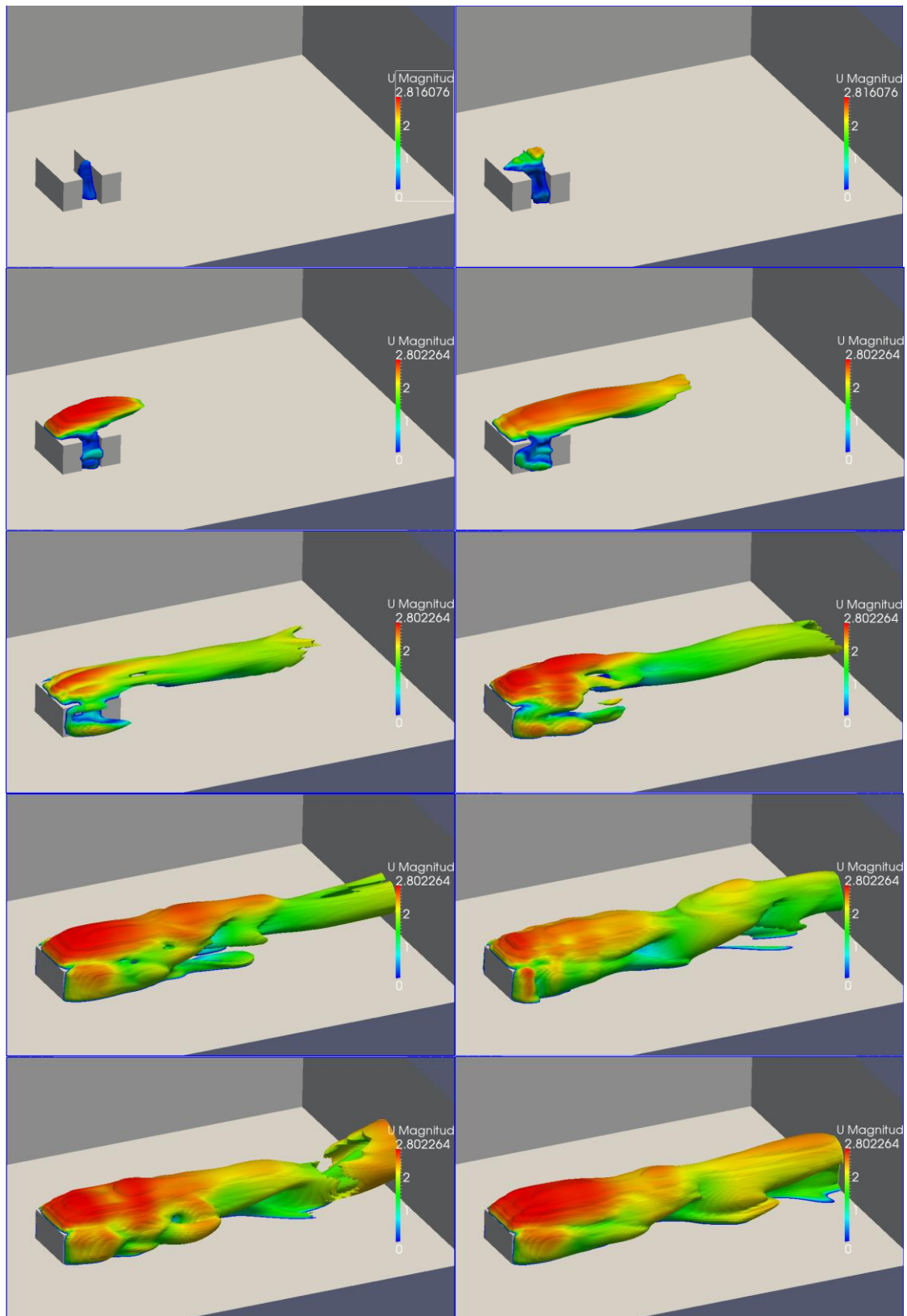


Figura V.1. Instantáneas del penacho a intervalos de 1 minuto. Helio a 1m/s

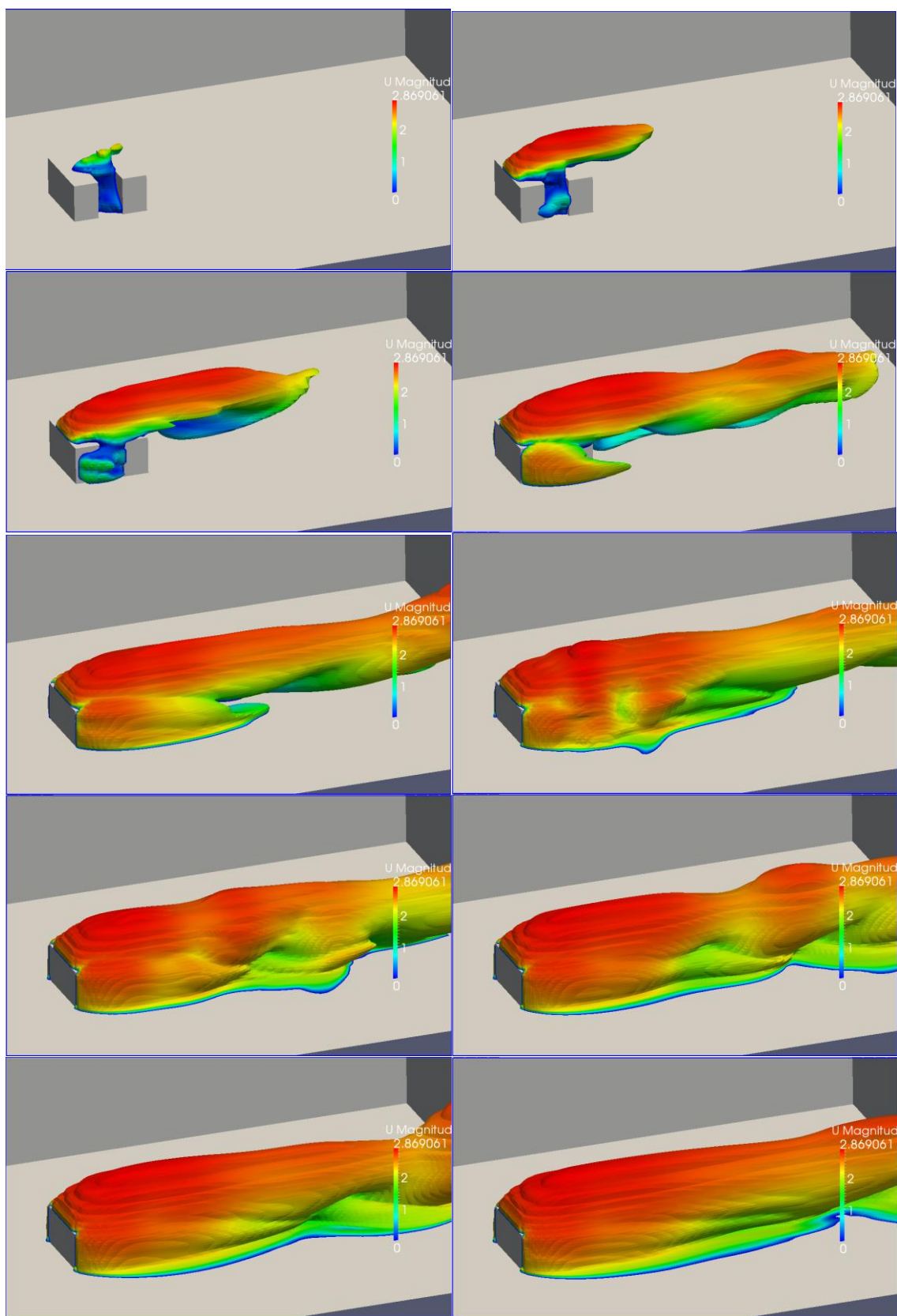


Figura V.2. Hexafluoruro de azufre a 1 m/s

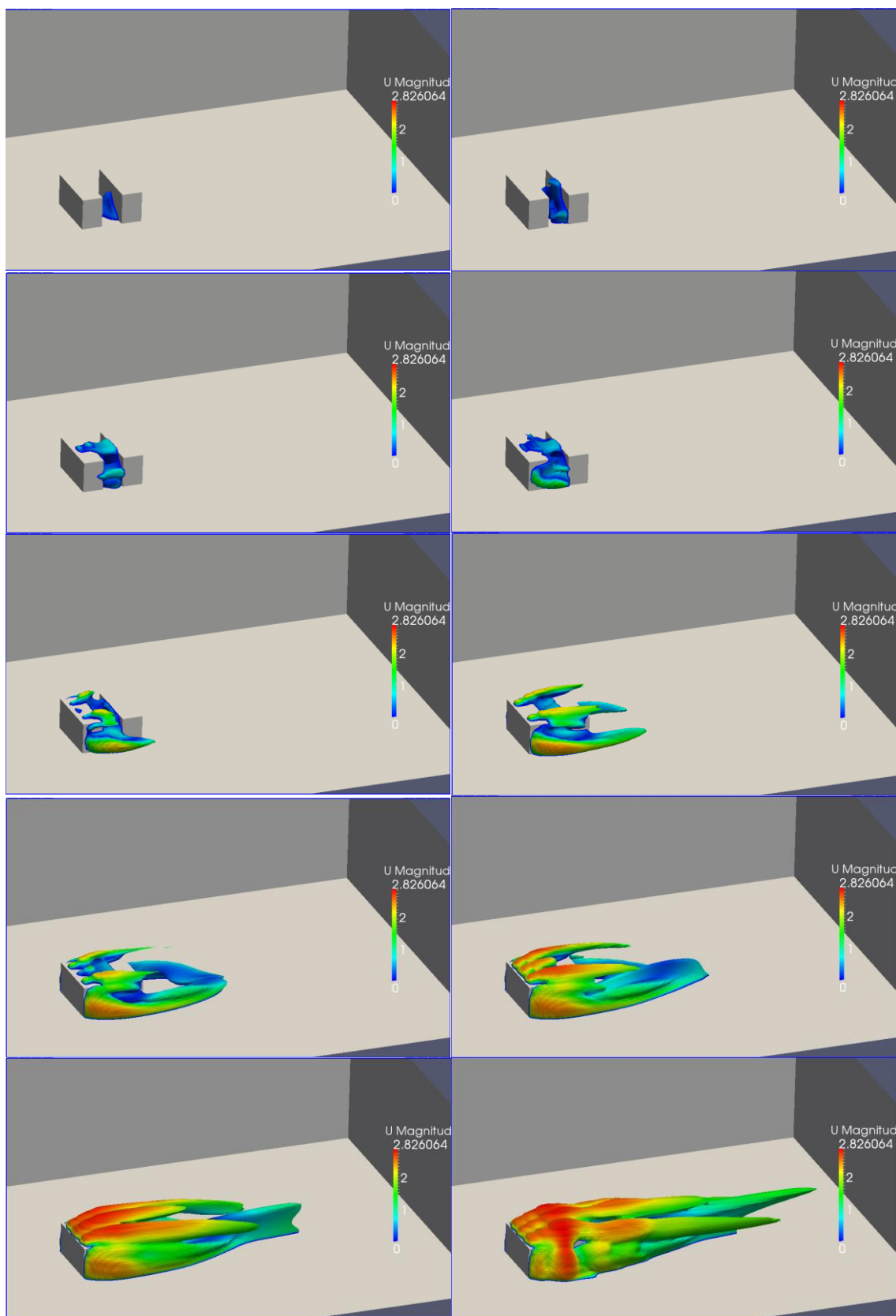


Figura V.3. Hexafluoruro de azufre a 0,0289 m/s

2) Evolución de las líneas de iso-concentración, a nivel del suelo

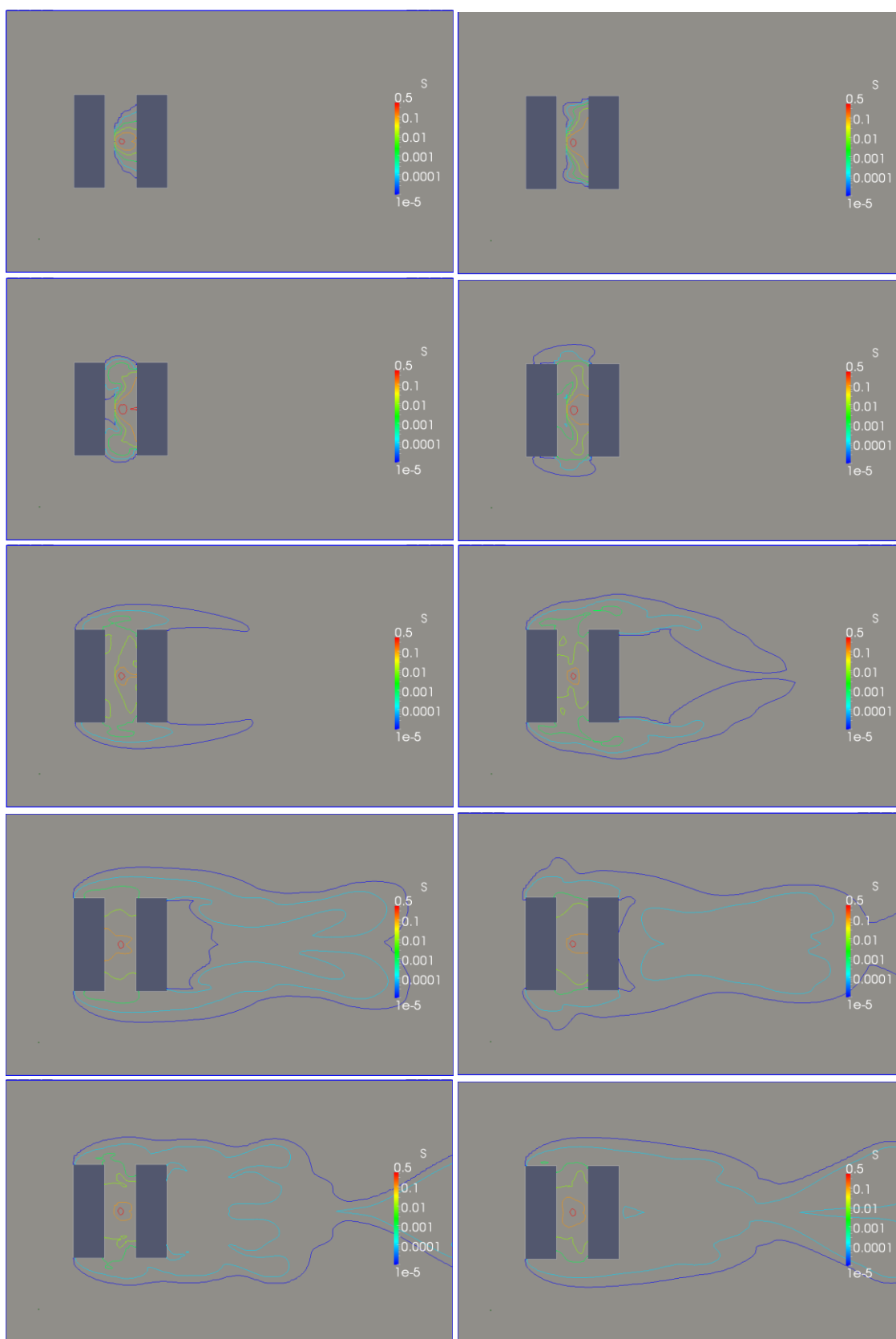


Figura V.4. Helio a 1 m/s

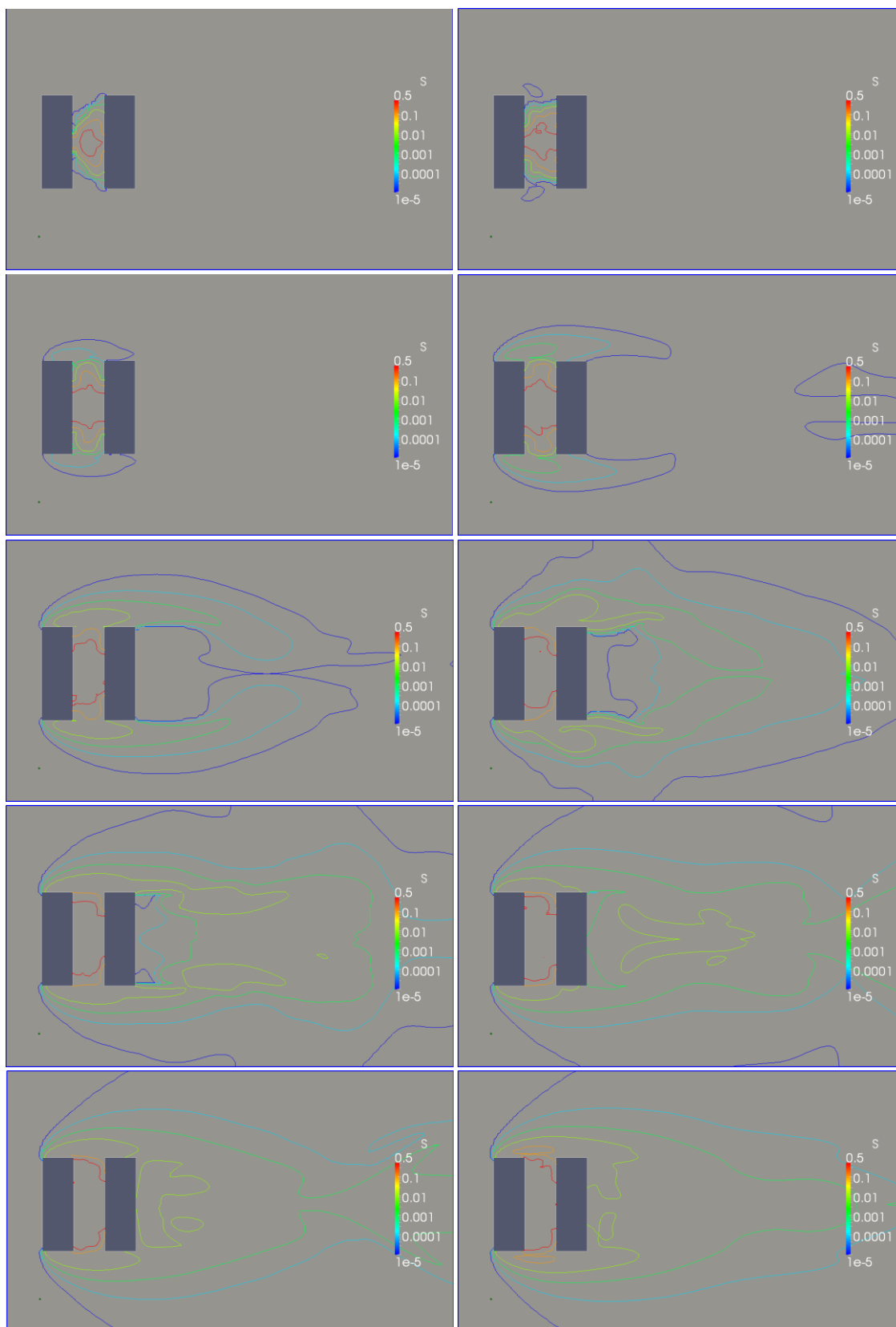


Figura V.5. Hexafluoruro de azufre a 1 m/s

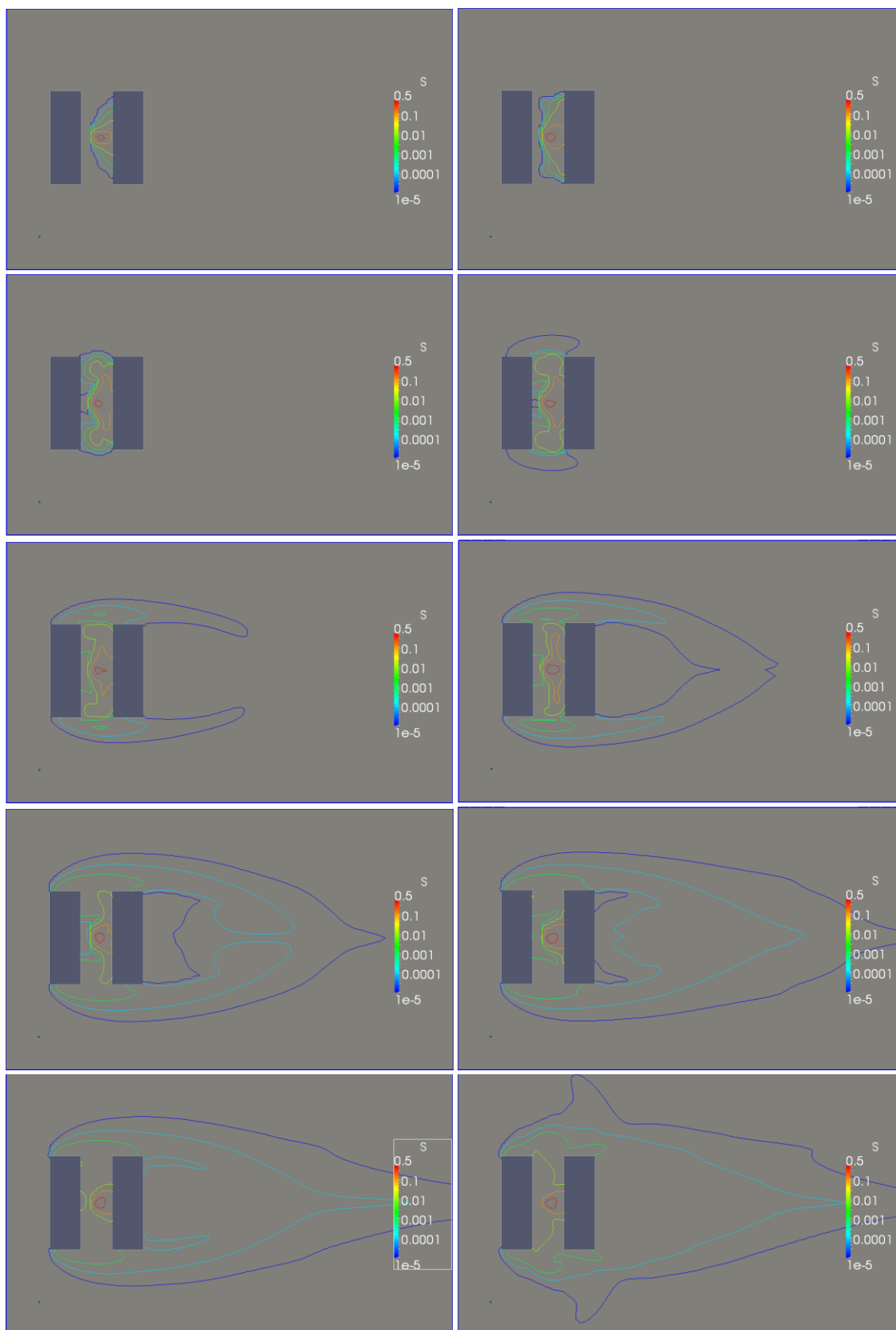


Figura V.5. Hexafluoruro de azufre a  $0.0289 \text{ m/s}$

## 2 Caso real: Edificio Torres Quevedo

### 2.1 Viento del NO

#### 2.1.1 Viento a 20 km/h

##### 1) Evolución del campo de concentraciones

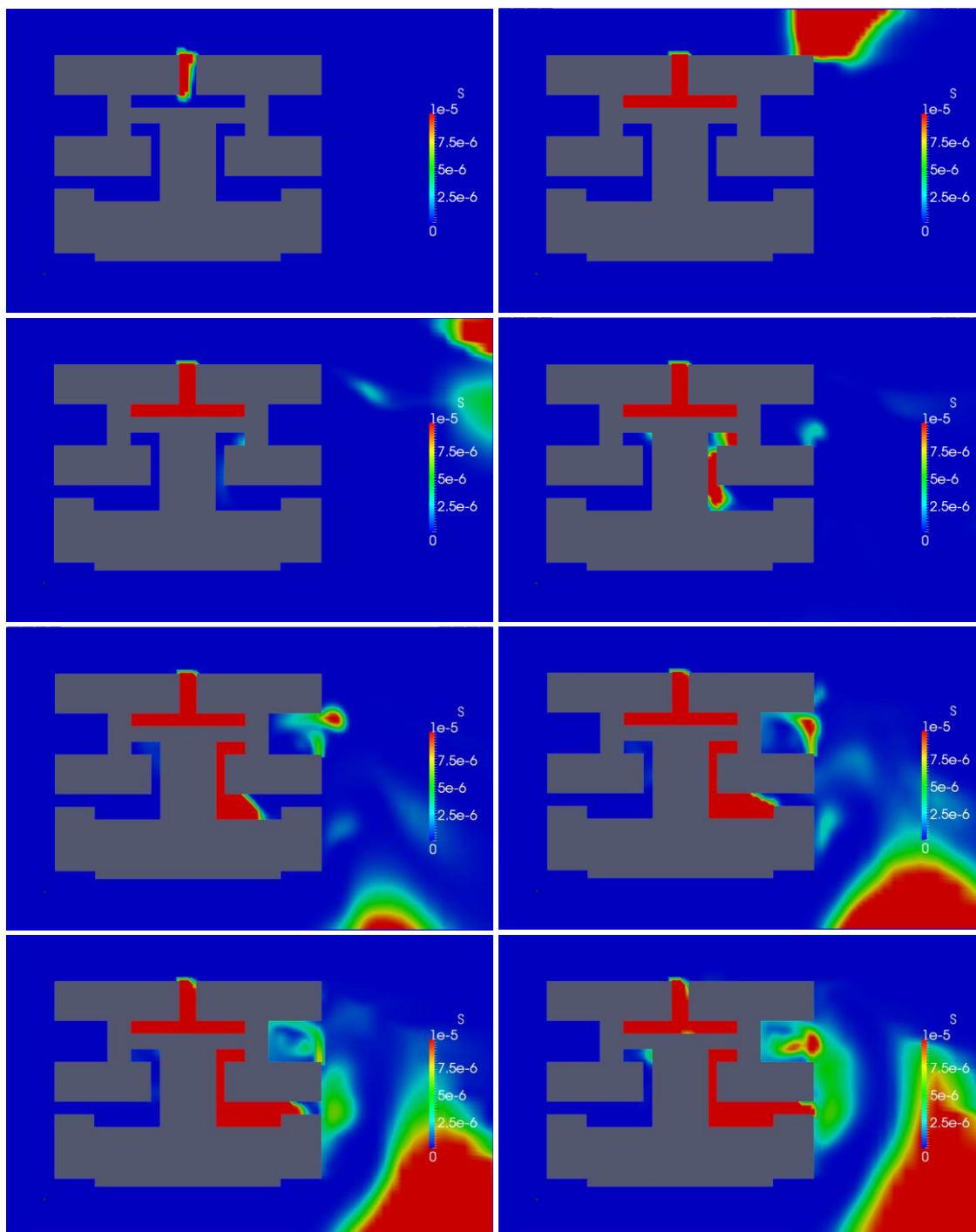


Figura V.7a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 20 km/h



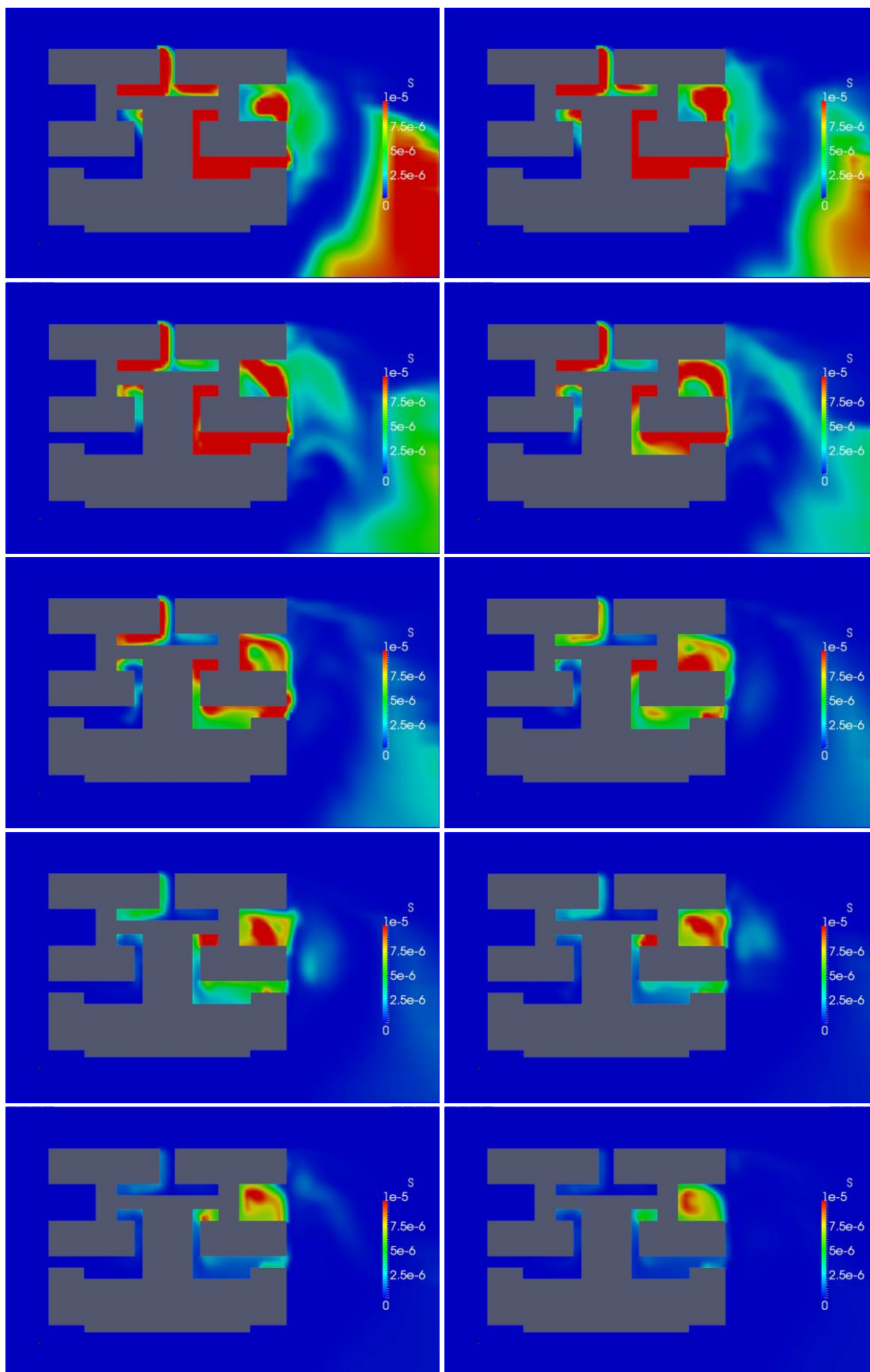


Figura V.7b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 20 km/h



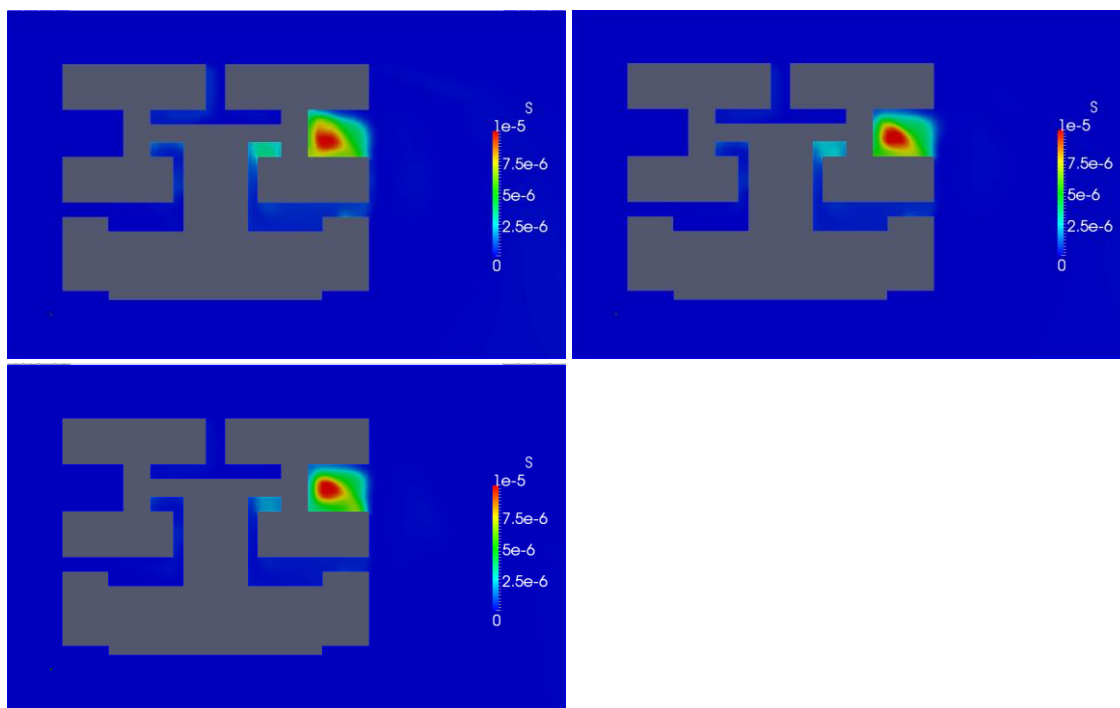


Figura V.7c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 20 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

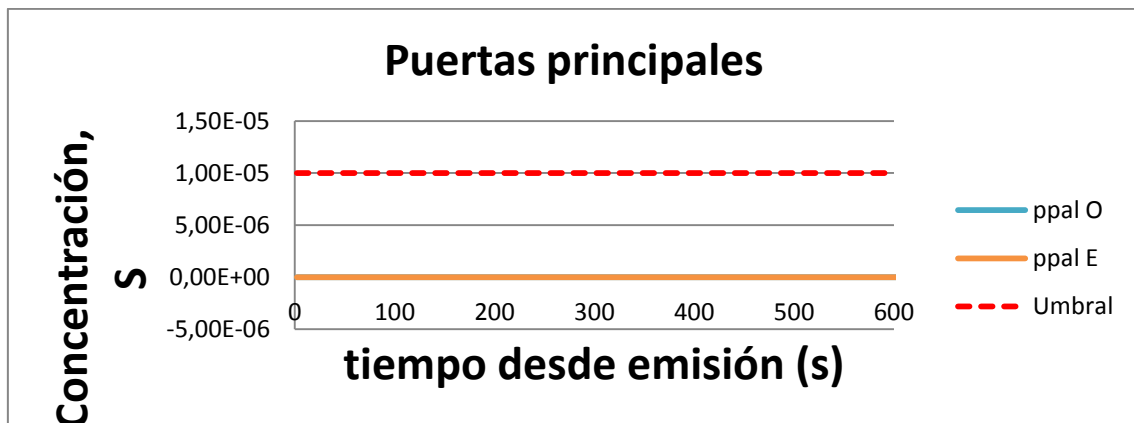


Figura V.8. Concentración en las puertas principales. Viento del NO a 20 km/h

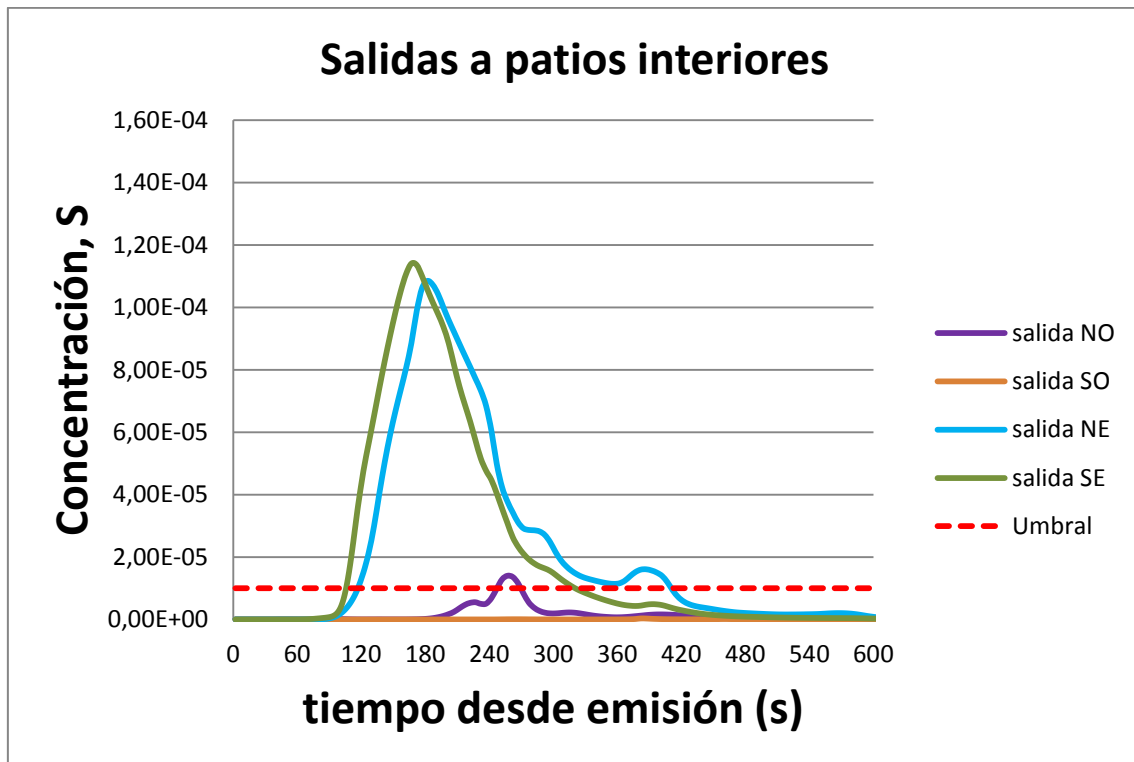


Figura V.9. Concentración en las salidas interiores. Viento del NO a 20 km/h

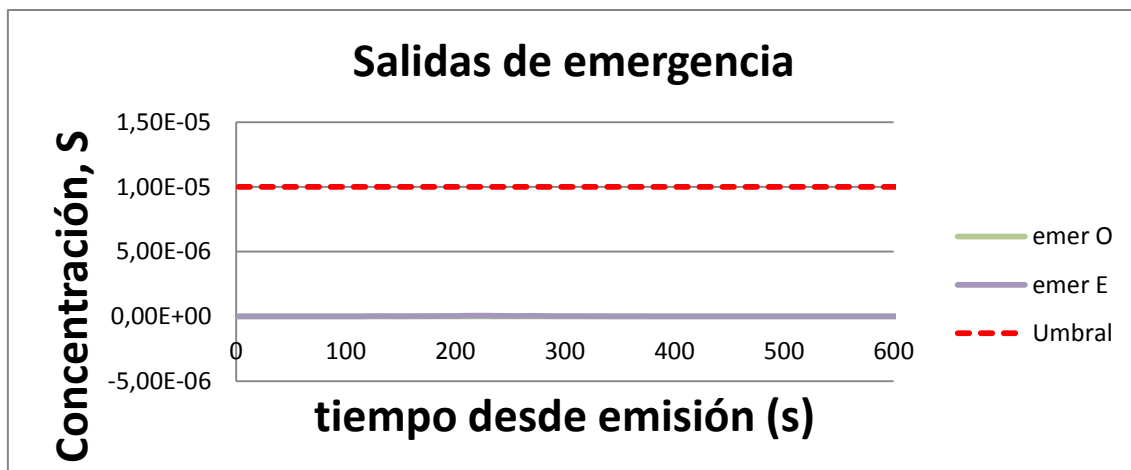


Figura V.10. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del NO a 20 km/h

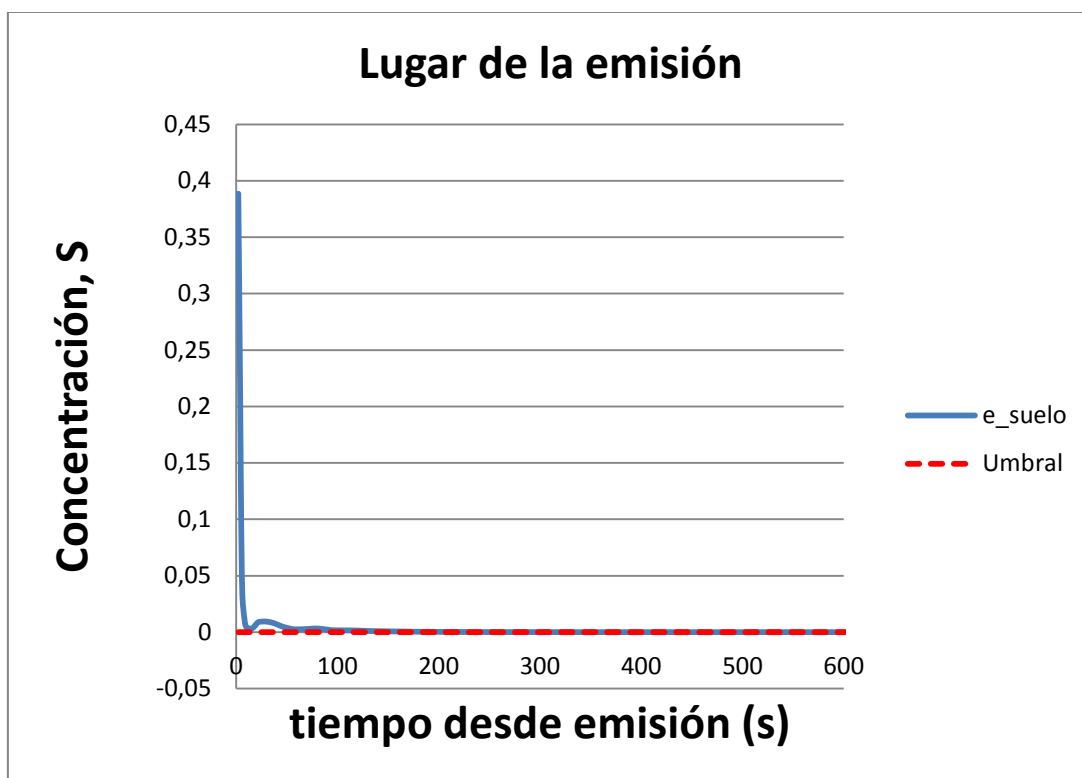


Figura V.11. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del NO a 20 km/h

## 2.1.2 Viento a 25 km/h

### 1) Evolución del campo de concentraciones

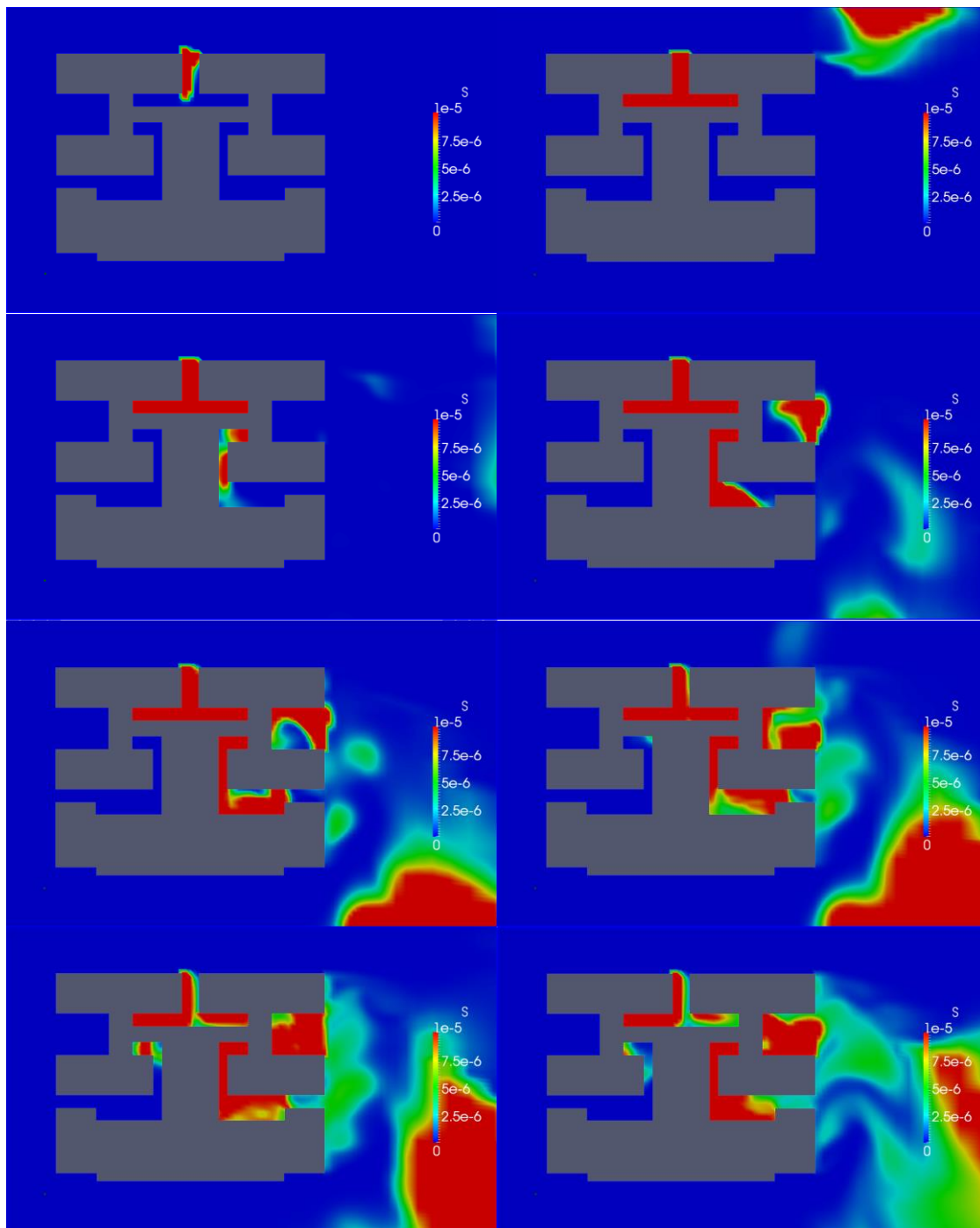


Figura V.13a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 25 km/h

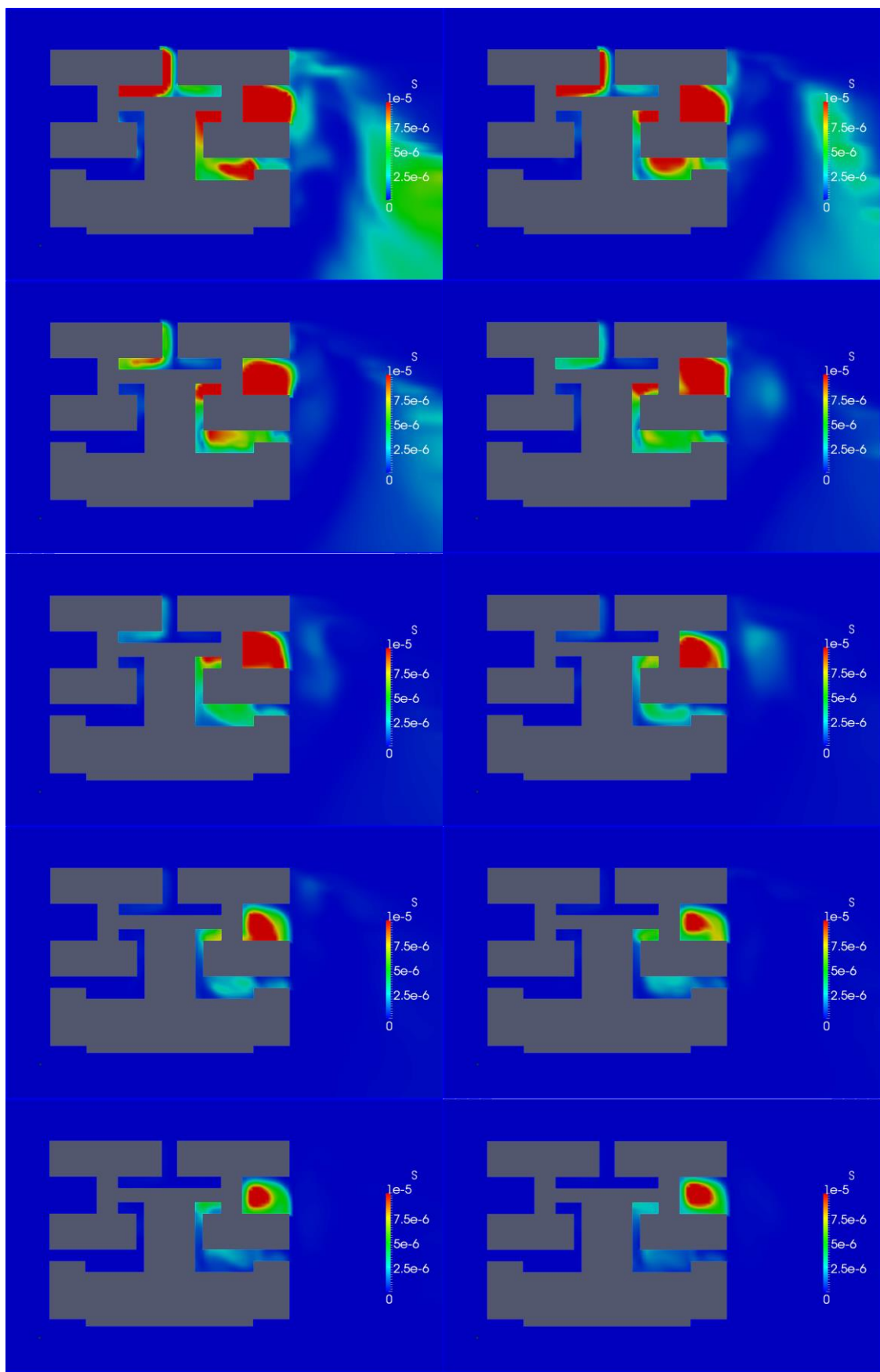


Figura V.13b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 25 km/h

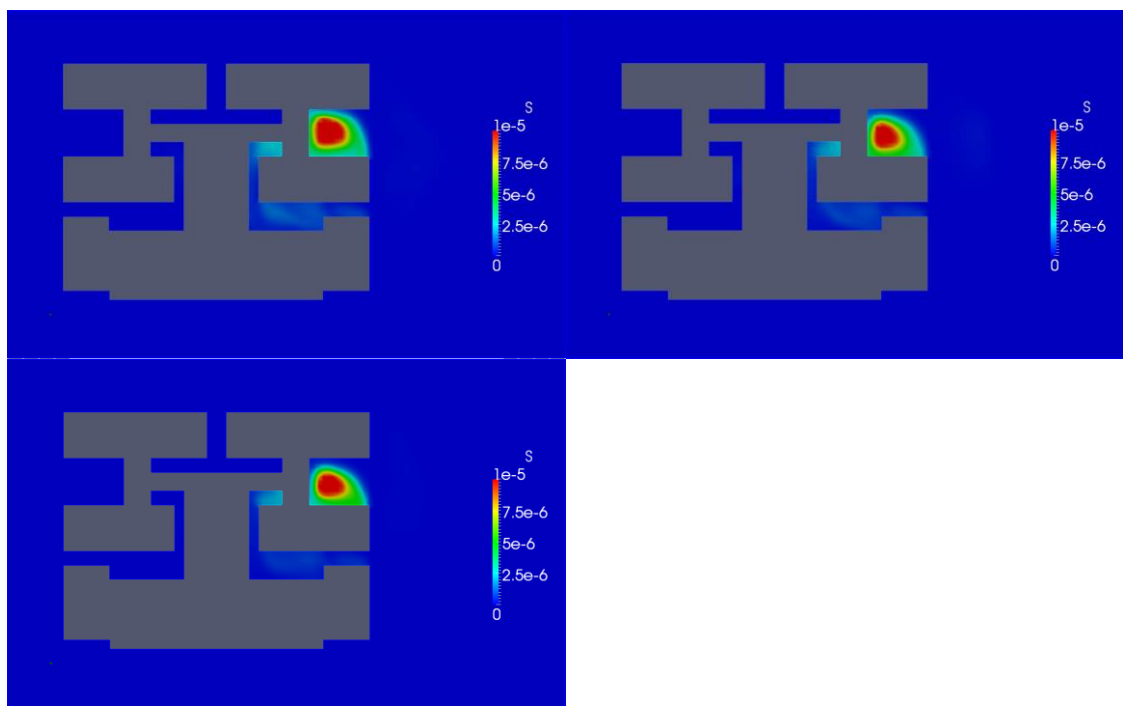


Figura V.13c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 25 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

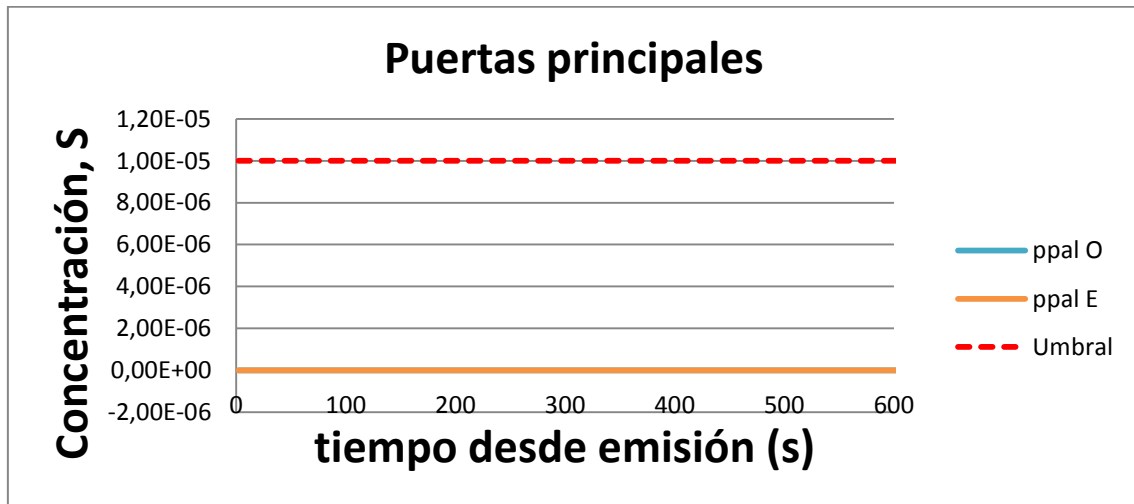


Figura V.14. Concentración en las puertas principales. Viento del NO a 25 km/h

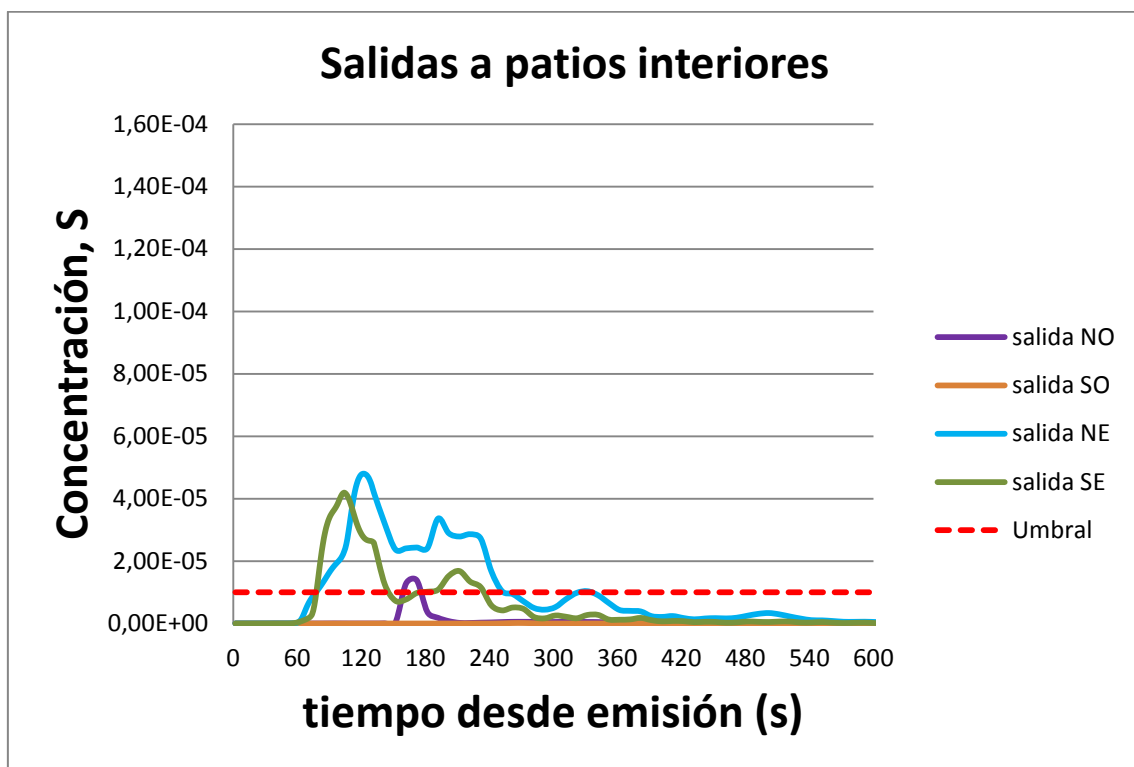


Figura V.15. Concentración en las salidas interiores. Viento del NO a 25 km/h

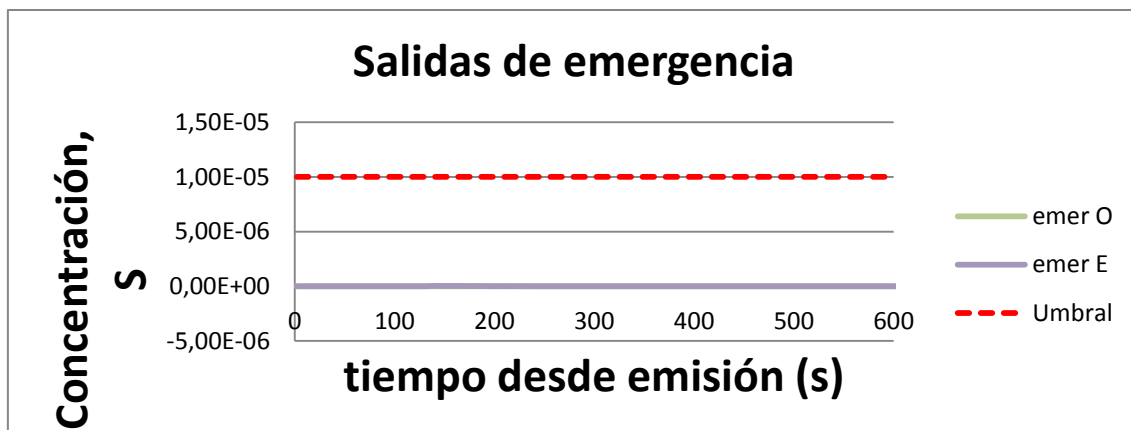


Figura V.16. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del NO a 25 km/h

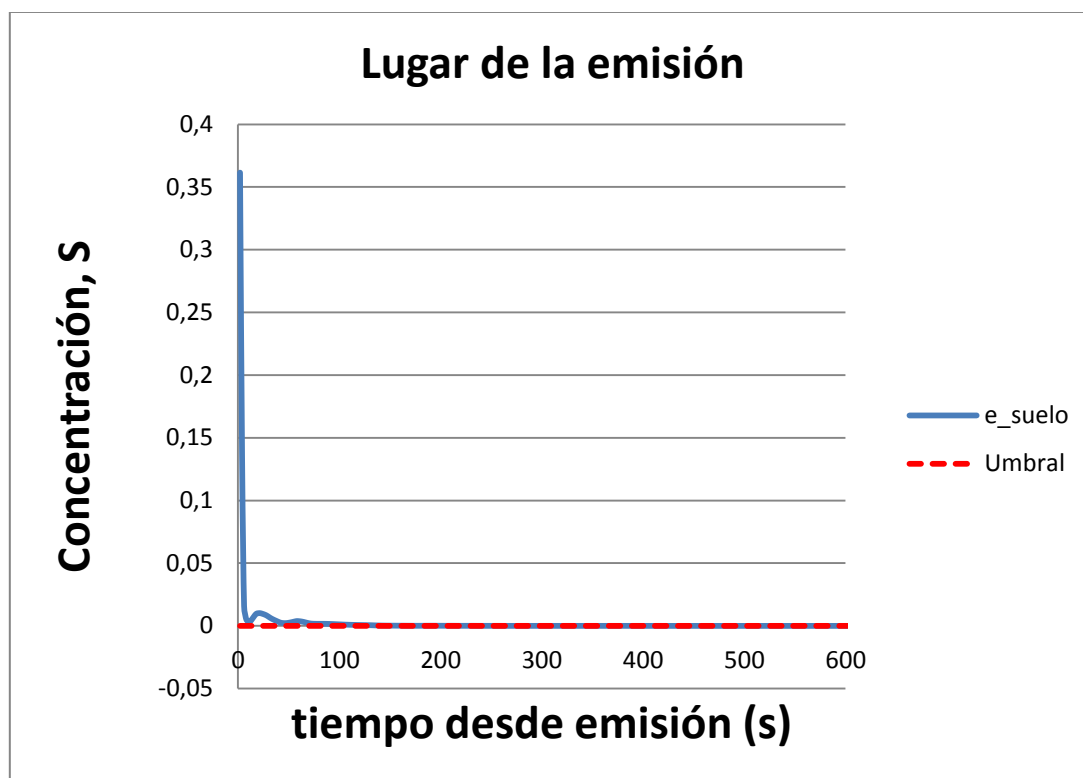


Figura V.17. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del NO a 25 km/h



### 2.1.3 Viento a 30 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

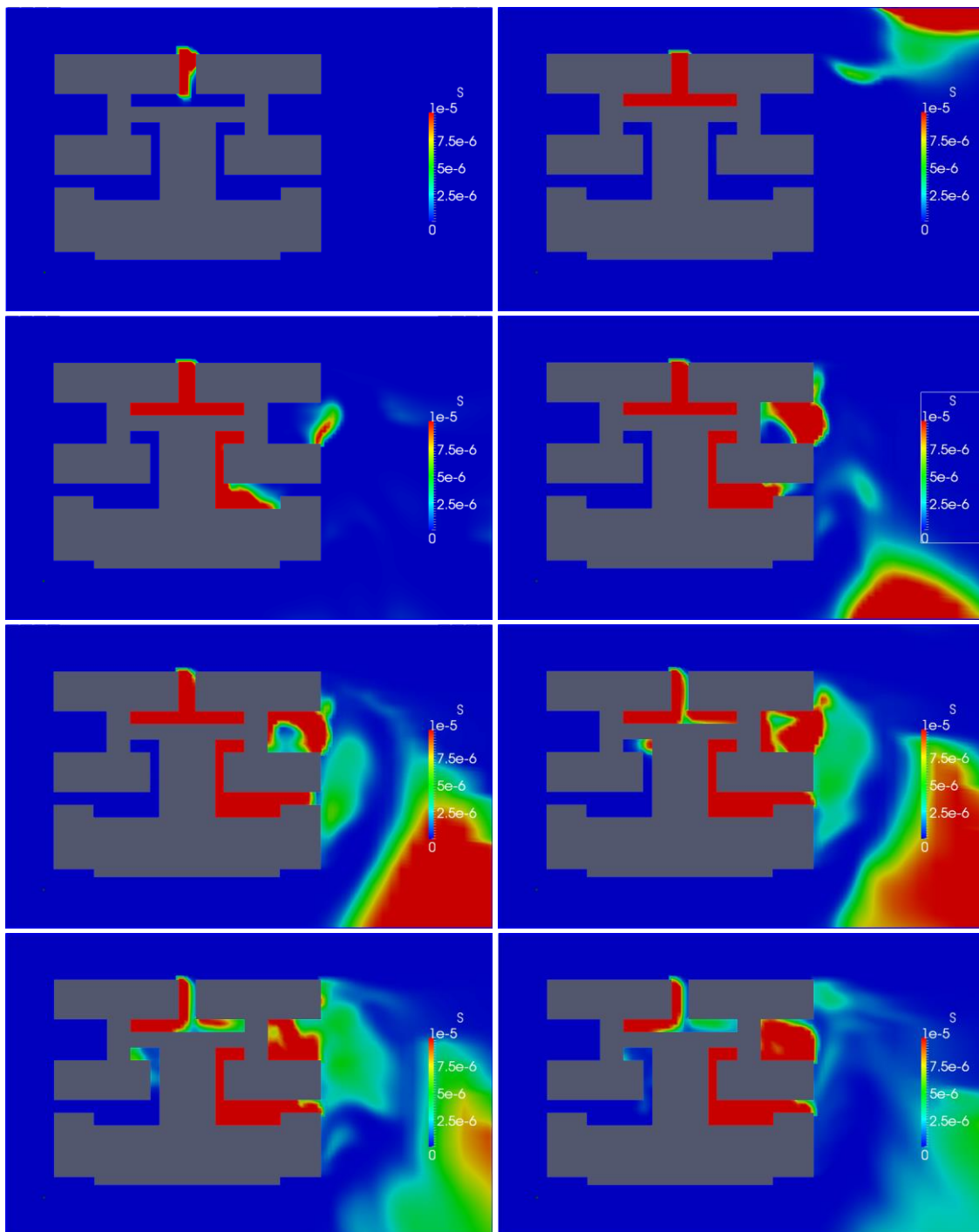


Figura V.19a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 30 km/h

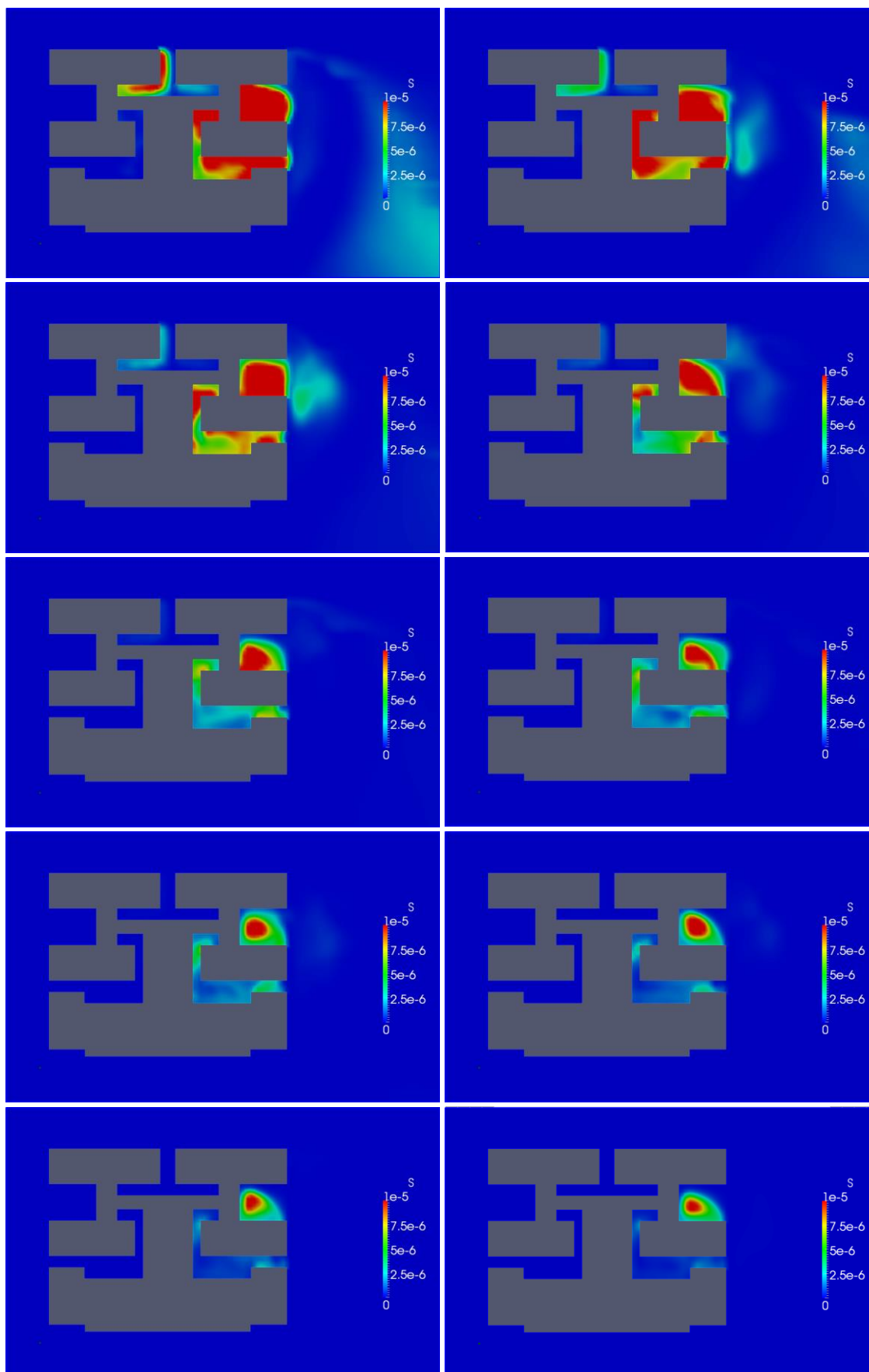


Figura V.19b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 30 km/h

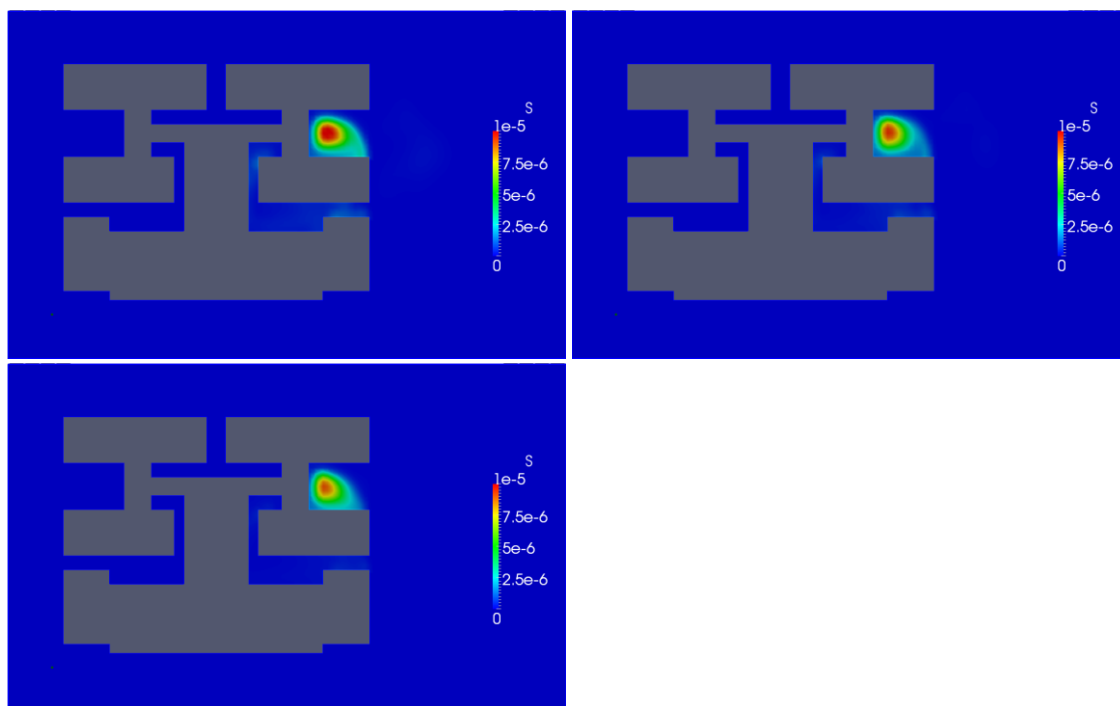


Figura V.19c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 30 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

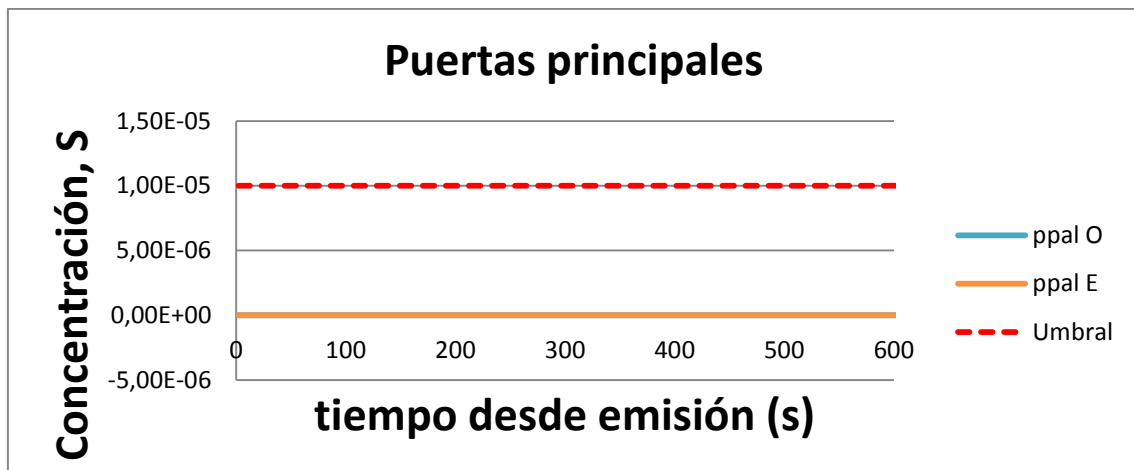


Figura V.20. Concentración en las puertas principales. Viento del NO a 30 km/h

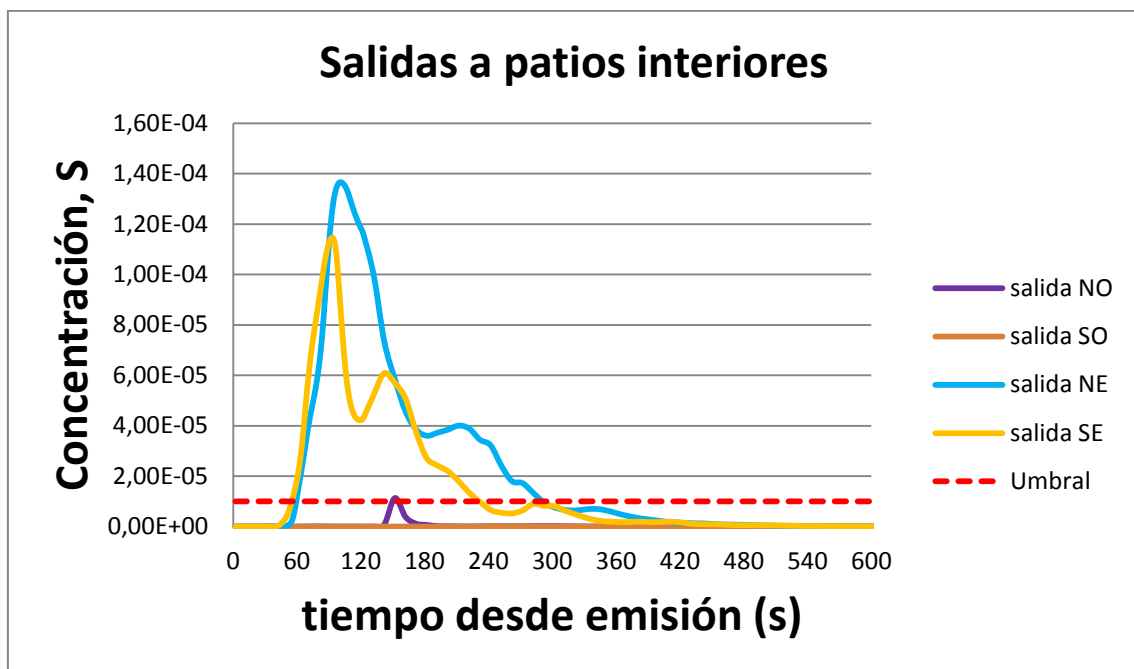


Figura V.21. Concentración en las salidas interiores. Viento del NO a 30 km/h

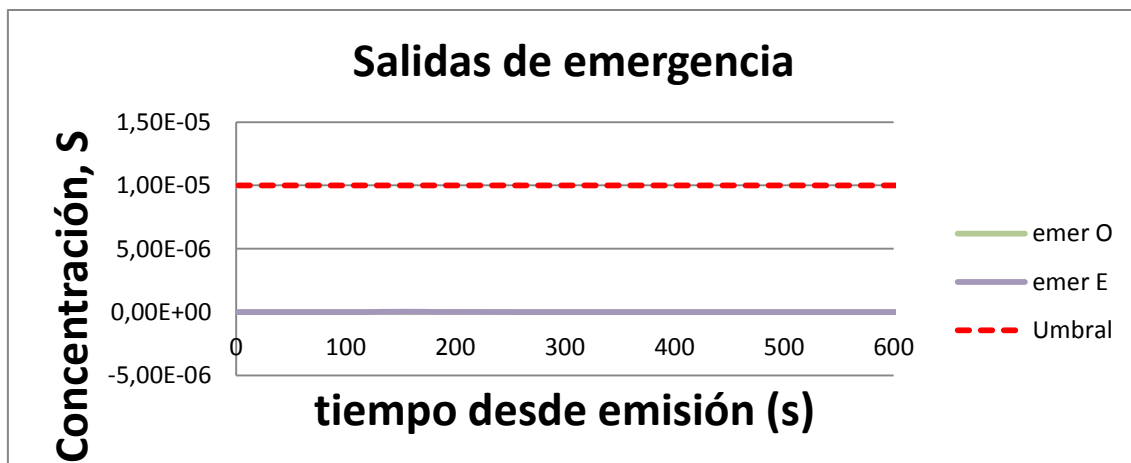


Figura V.22. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del NO a 30 km/h

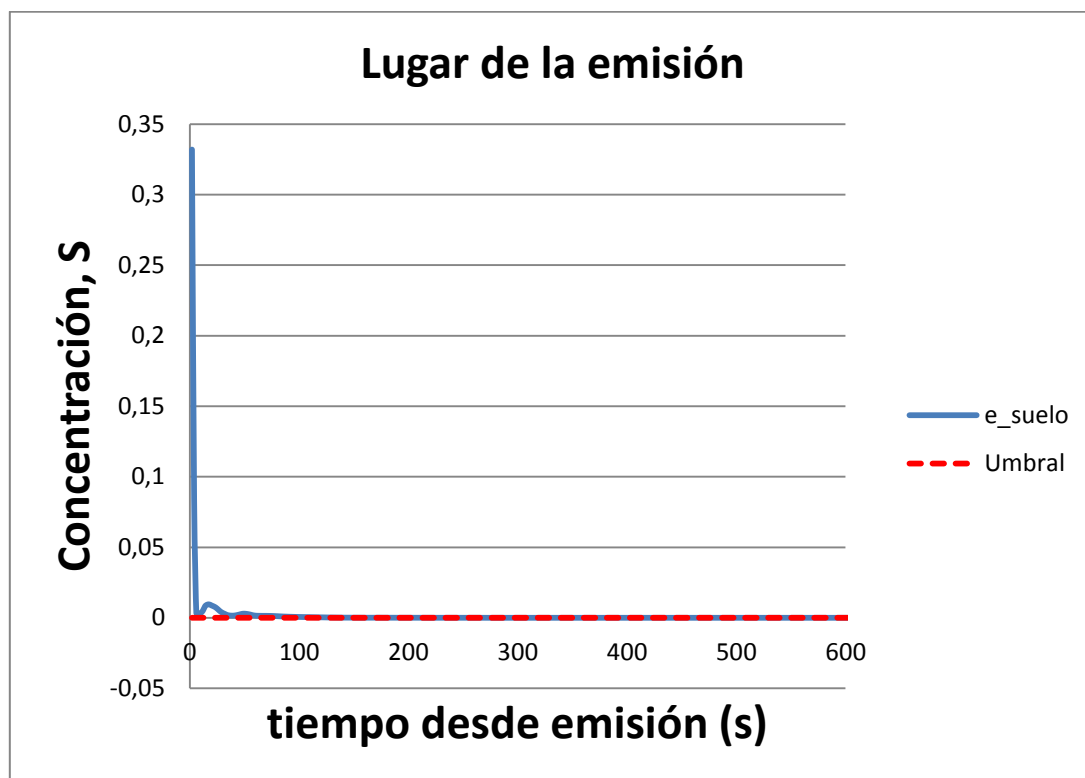


Figura V.23. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del NO a 30 km/h

## 2.1.4 Viento a 35 km/h

### 1) Evolución del campo de concentraciones

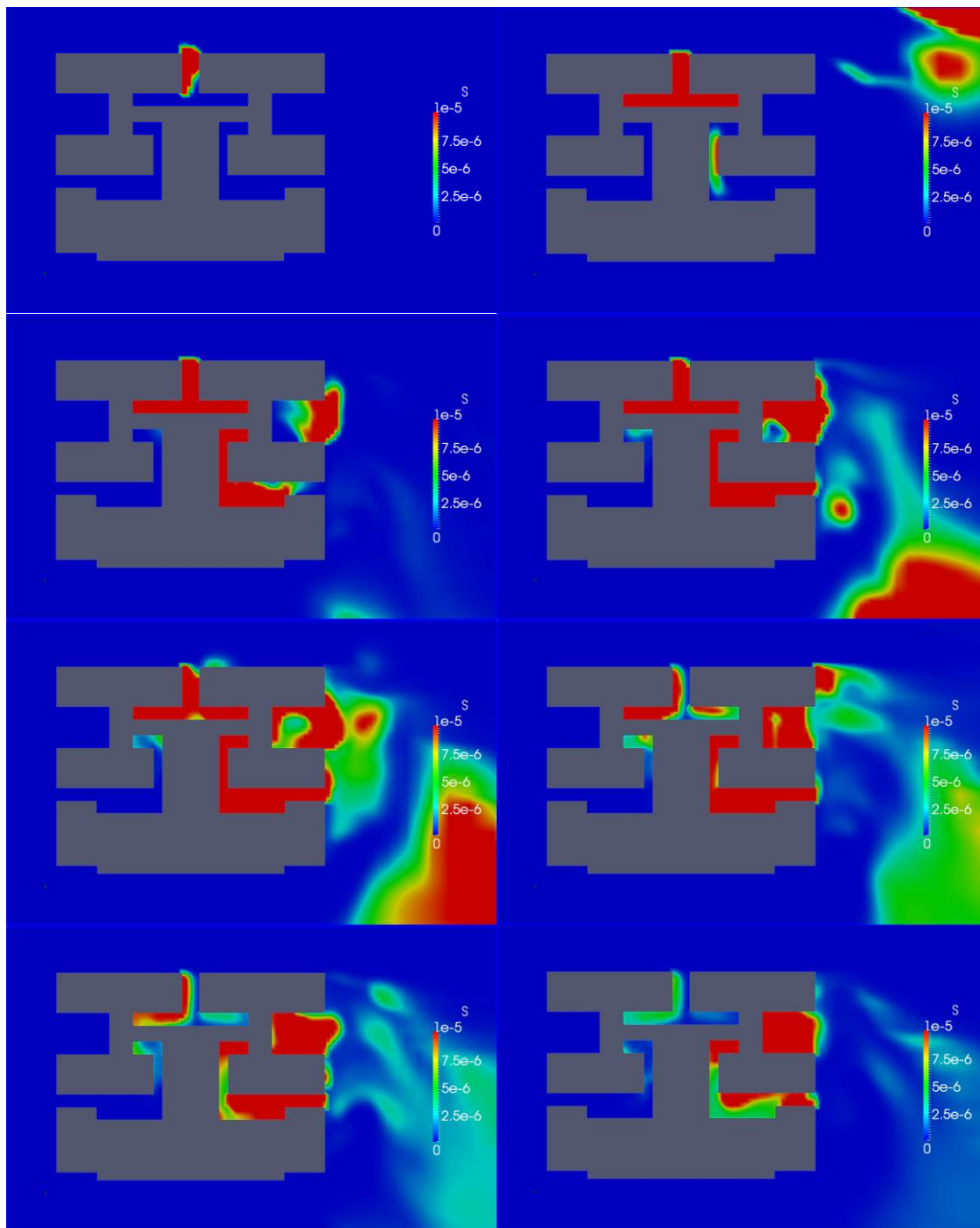


Figura V.25a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 35 km/h

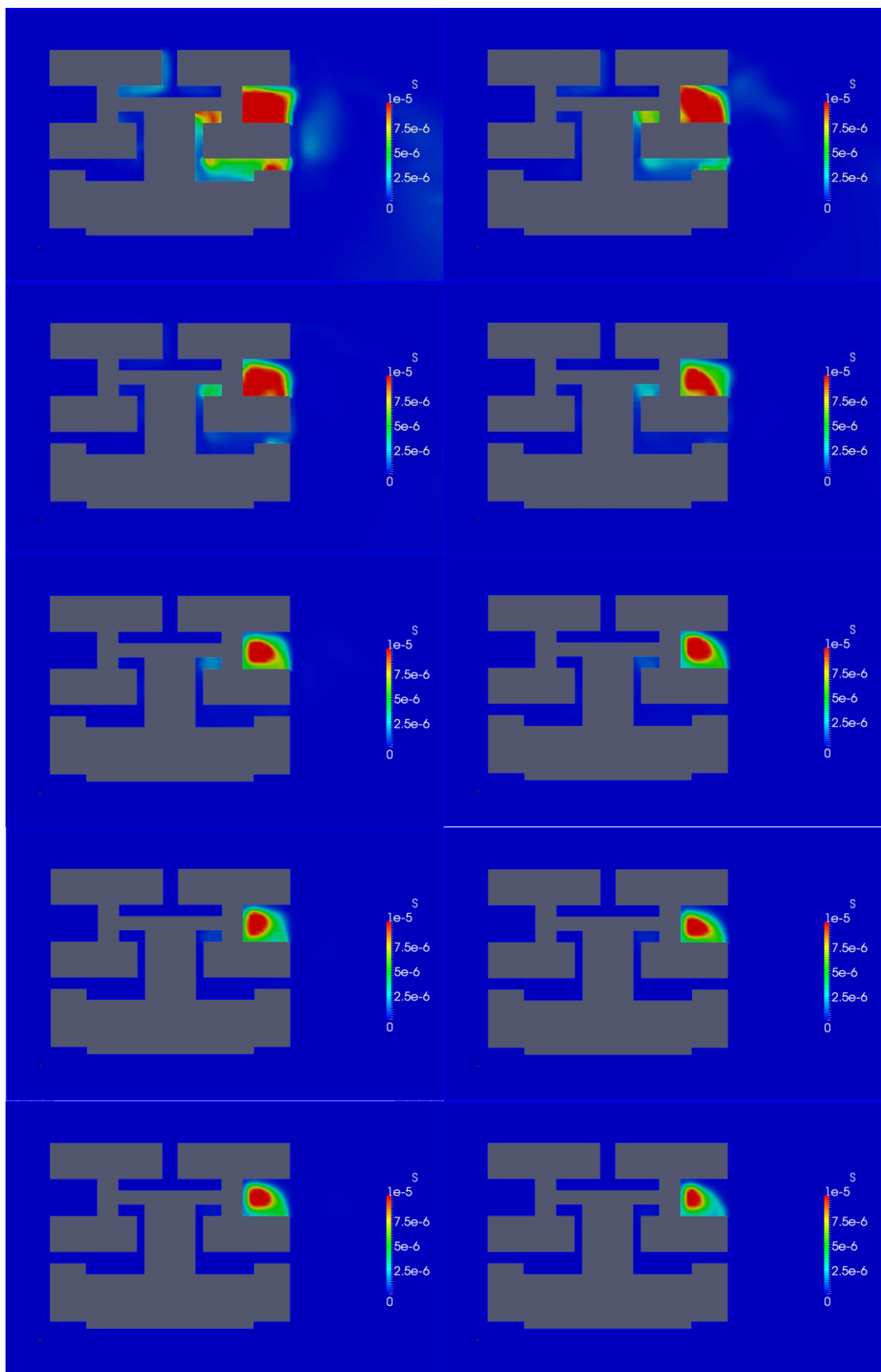


Figura V.25b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 35 km/h

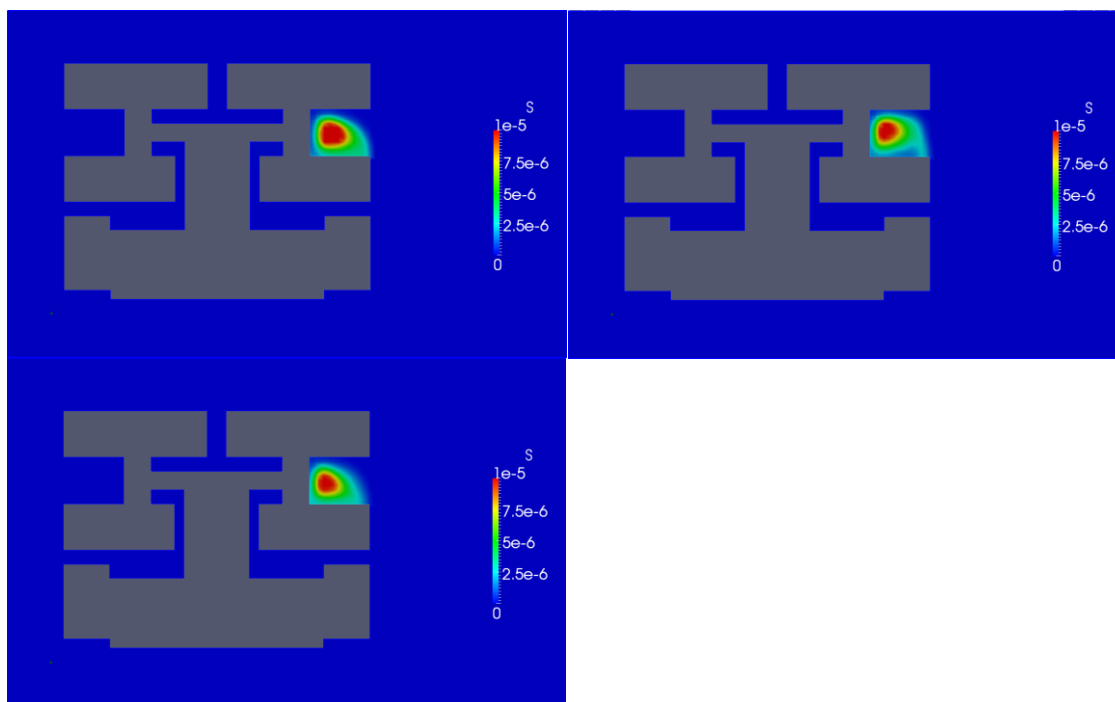


Figura V.25c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 35 km/h



## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

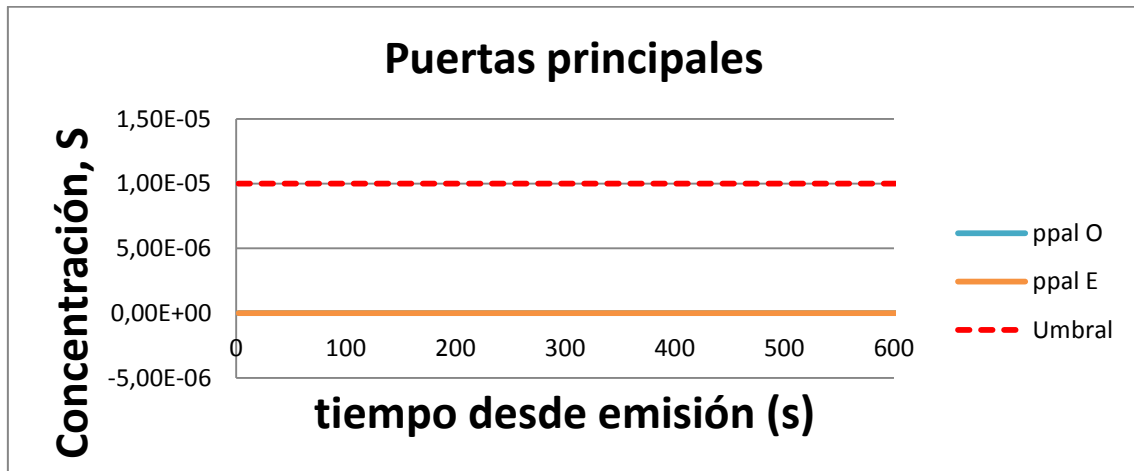


Figura V.26. Concentración en las puertas principales. Viento del NO a 35 km/h

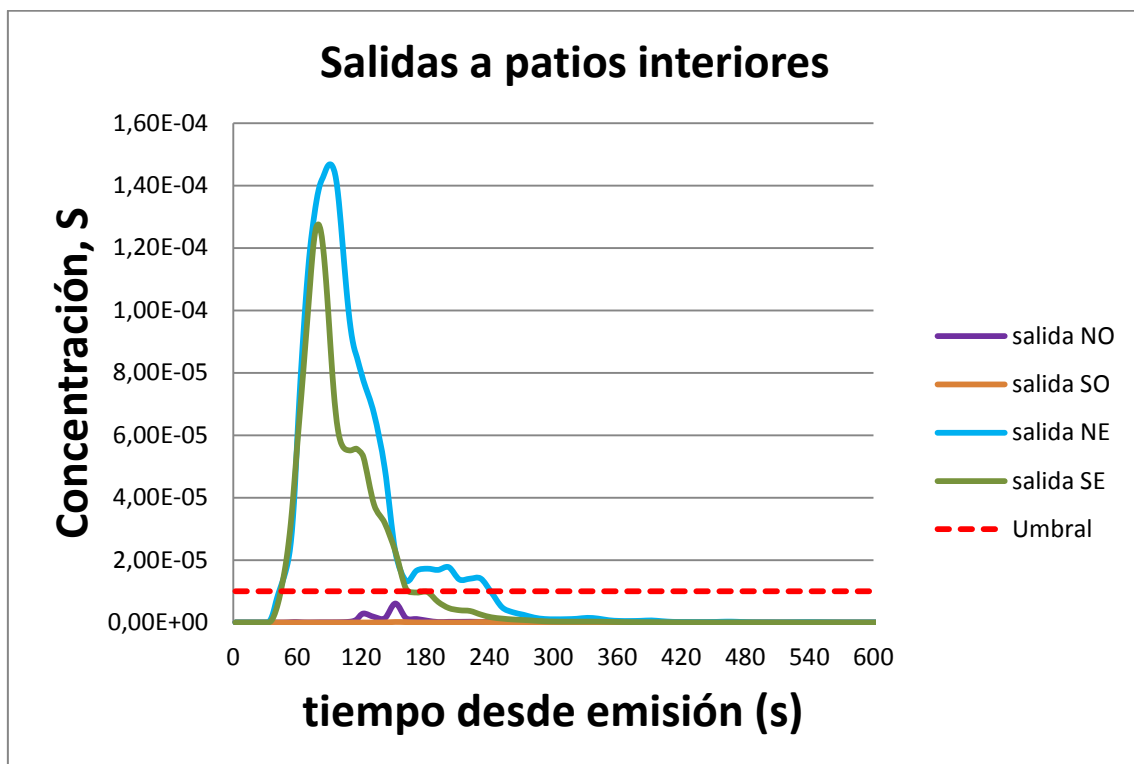


Figura V.26. Concentración en las salidas interiores. Viento del NO a 35 km/h

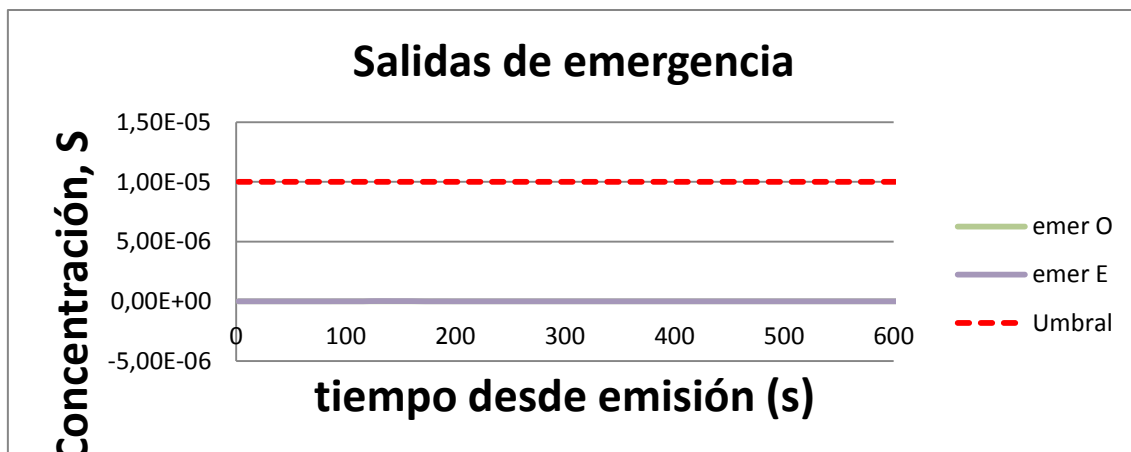


Figura V.27. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del NO a 35 km/h

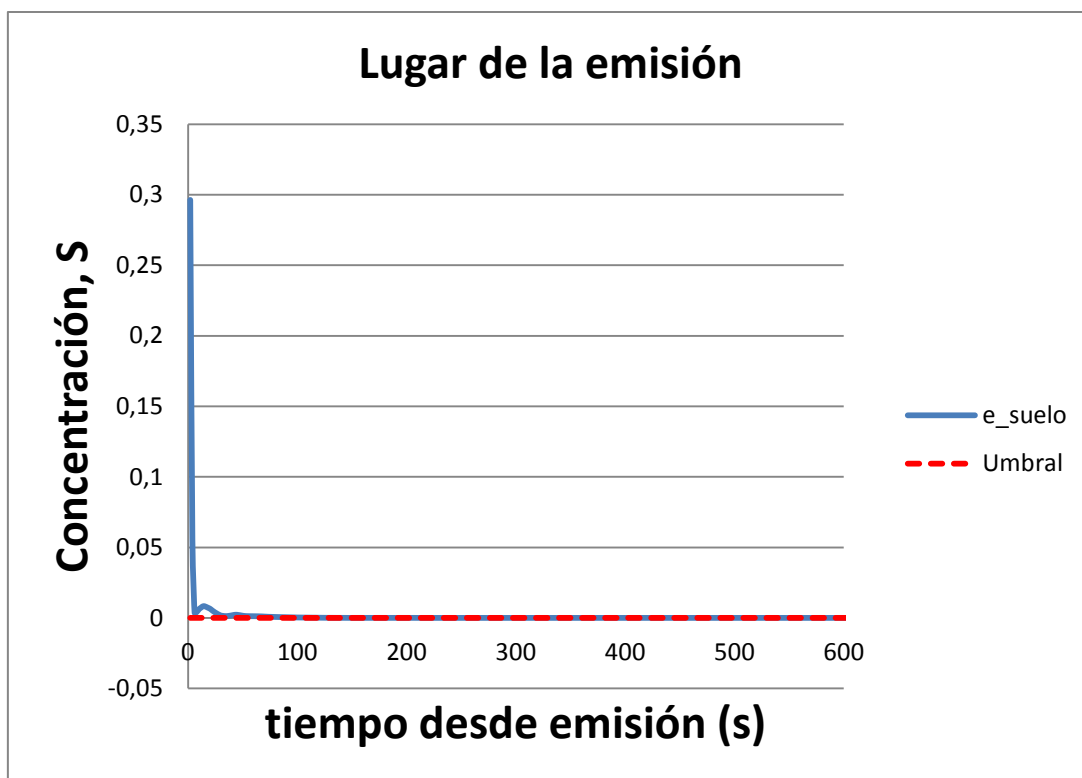


Figura V.28. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del NO a 35 km/h

### 2.1.5 Viento a 40 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

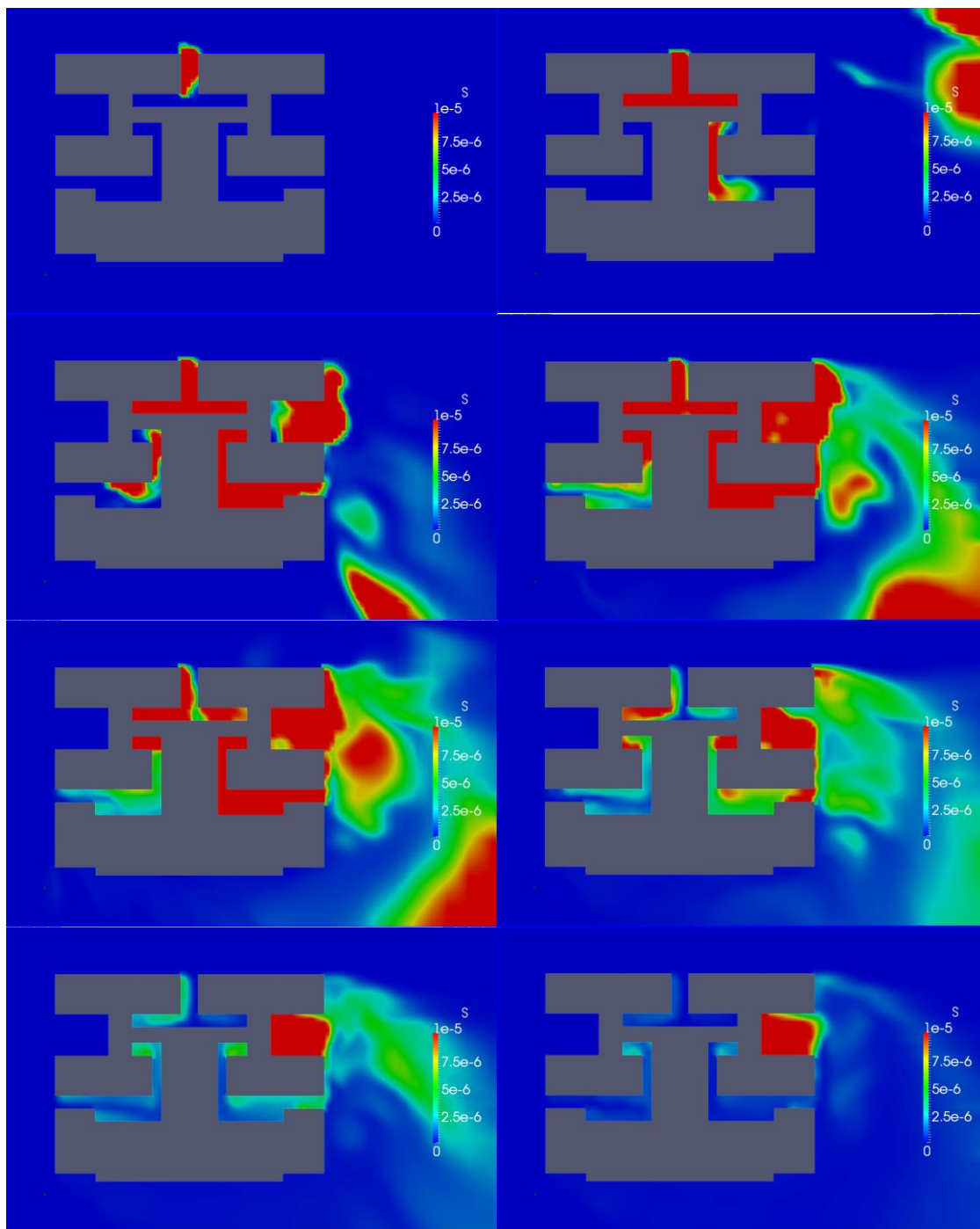


Figura V.30a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 40 km/h

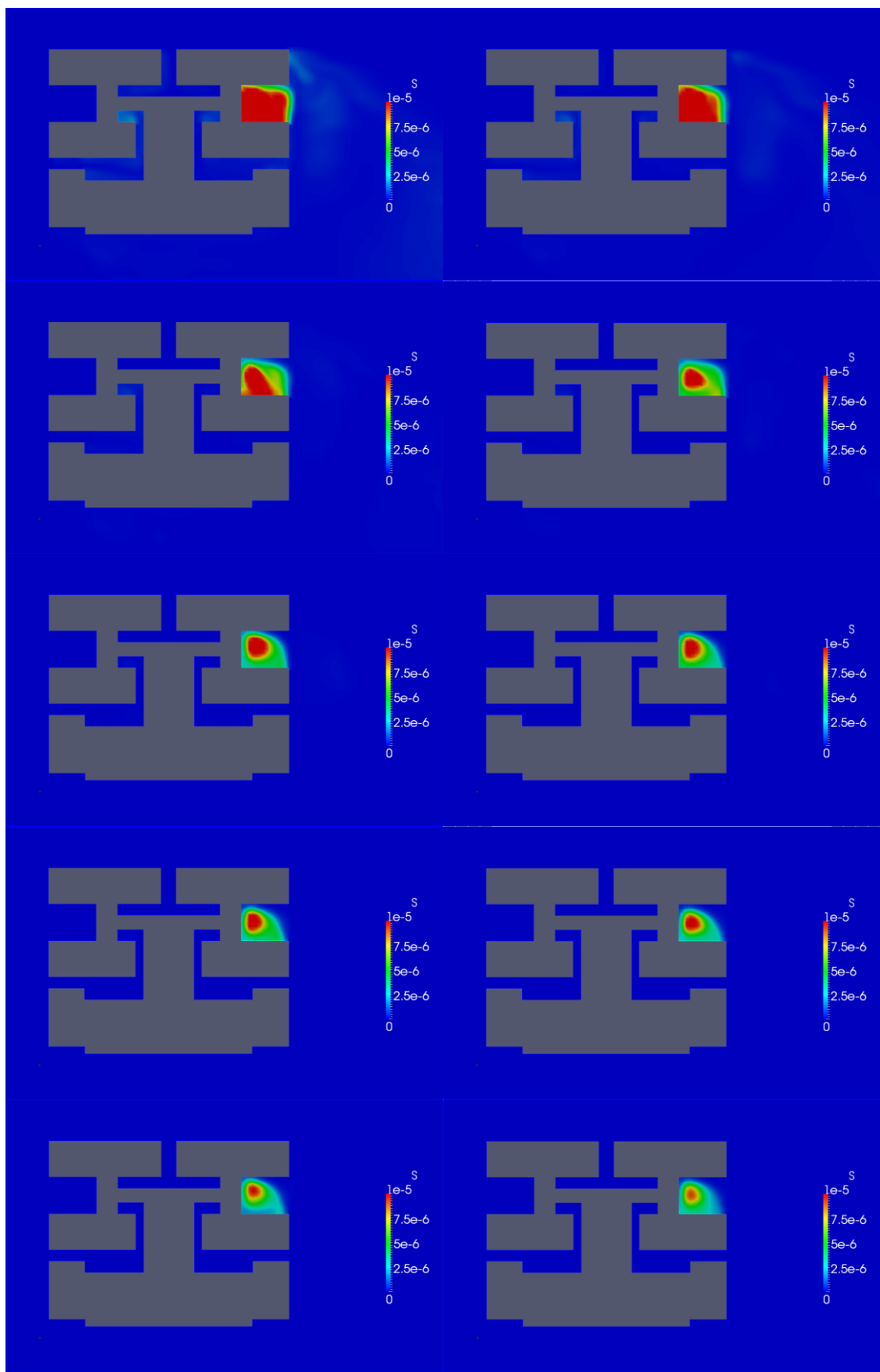


Figura V.30b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 40 km/h

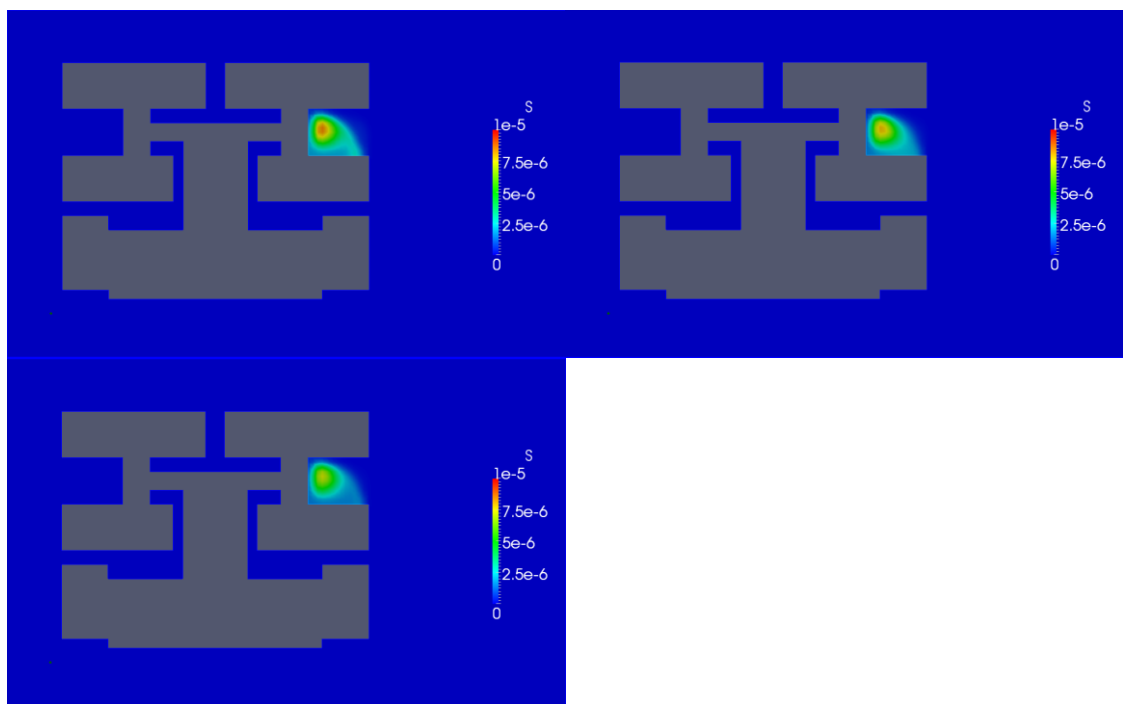


Figura V.30c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del NO a 40 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

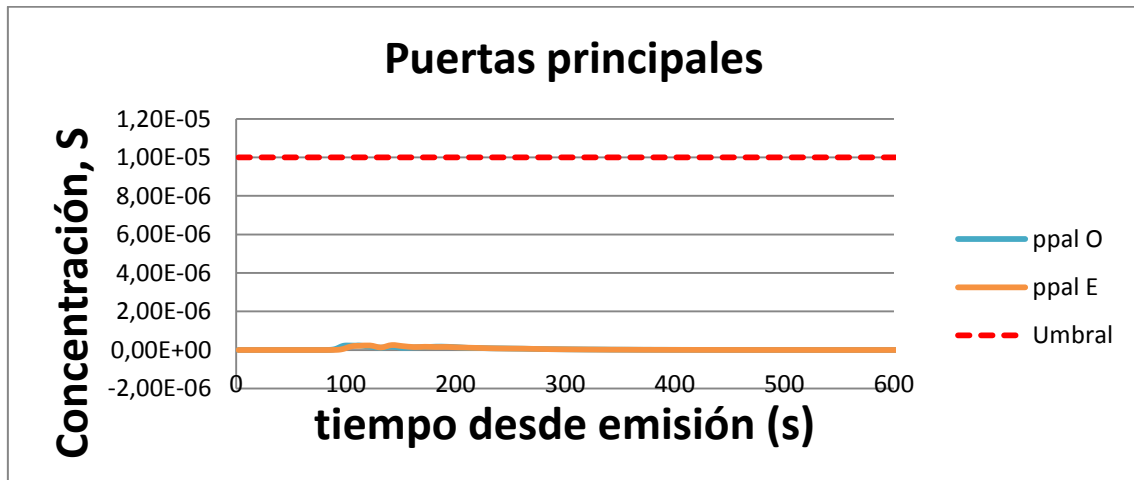


Figura V.31. Concentración en las puertas principales. Viento del NO a 40 km/h

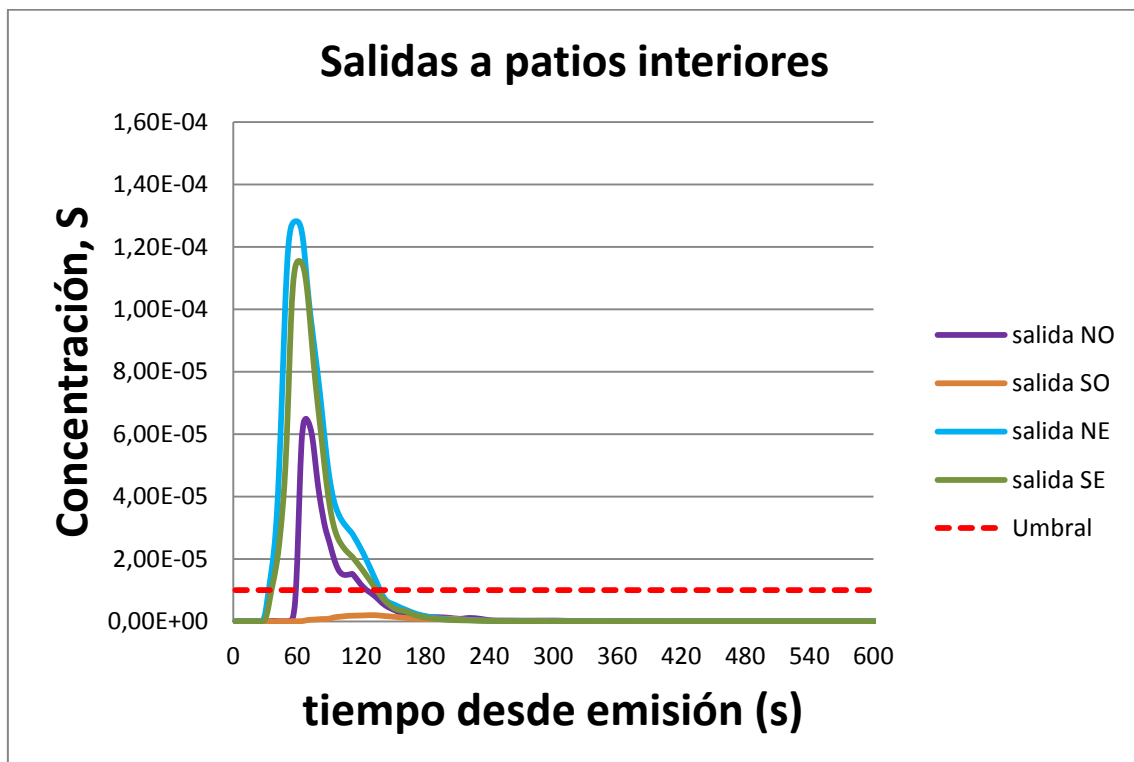


Figura V.32. Concentración en las salidas interiores. Viento del NO a 40 km/h

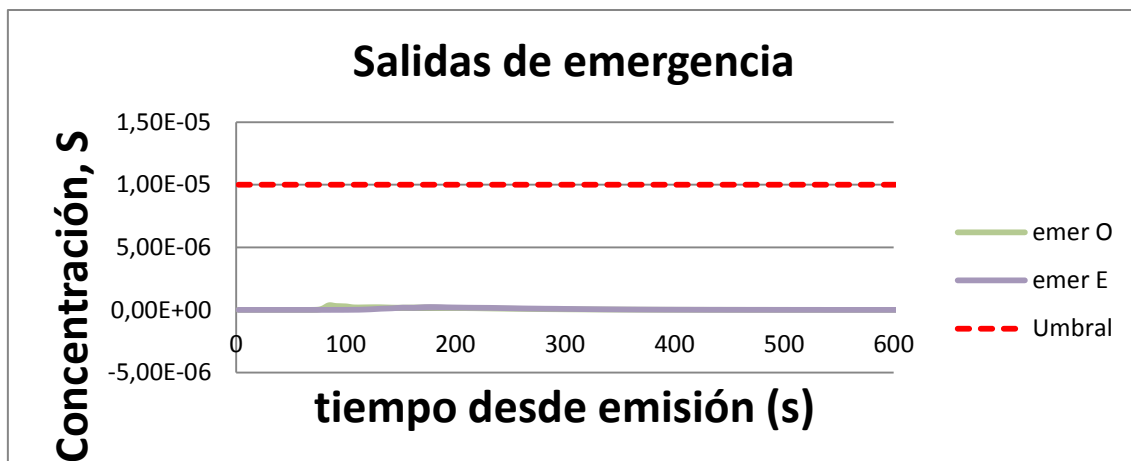


Figura V.33. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del NO a 40 km/h

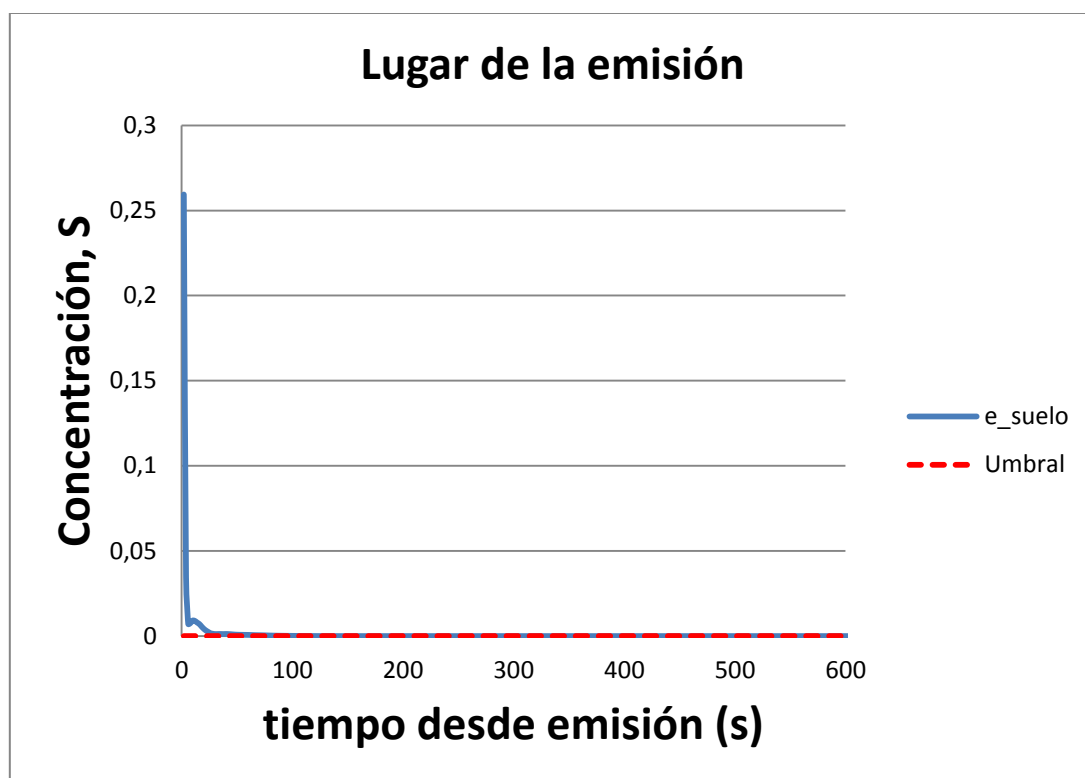


Figura V.34. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del NO a 40 km/h

## 2.2 Viento del N-NO

### 2.2.1 Viento a 20 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

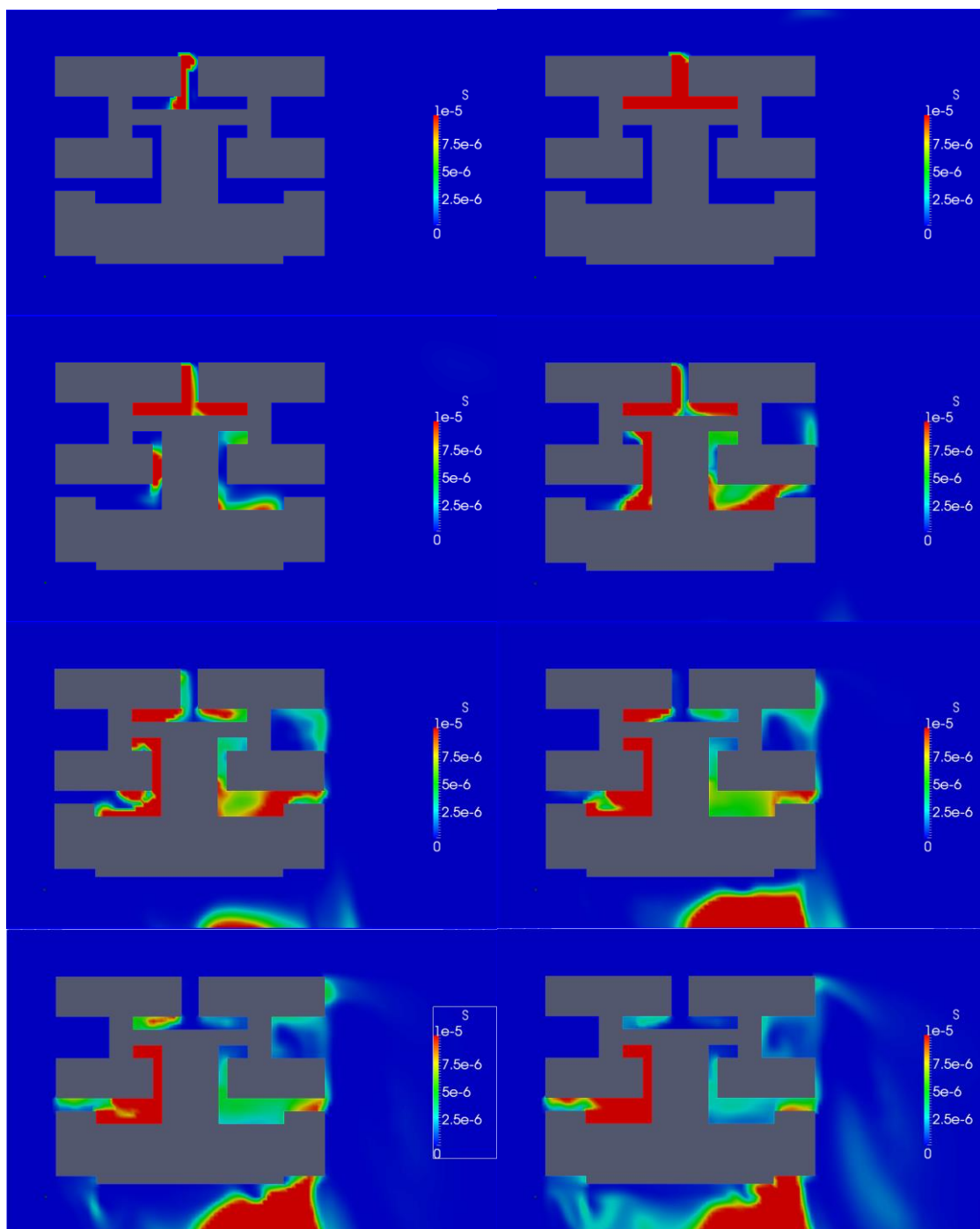


Figura V.36a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 20 km/h



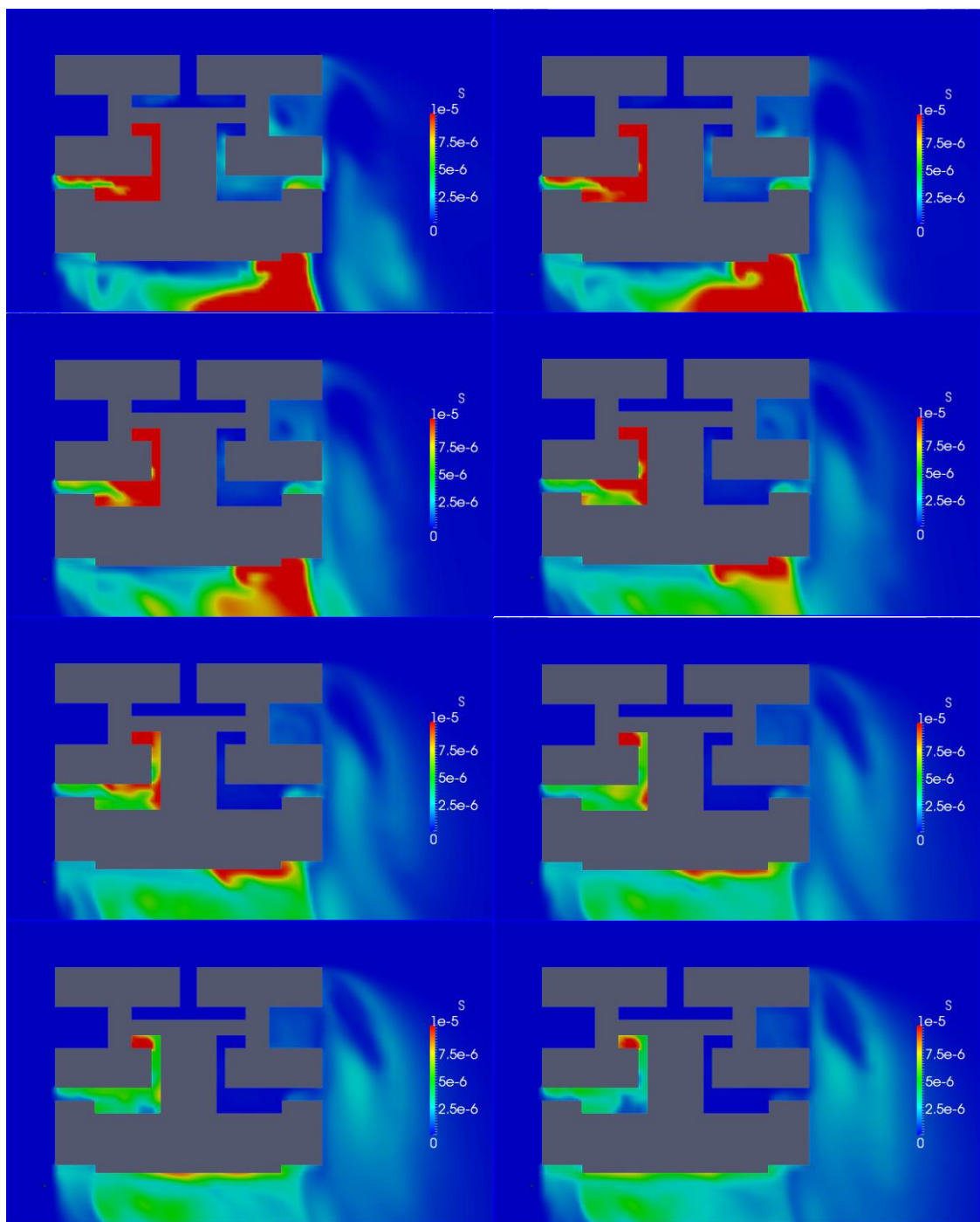


Figura V.36b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 20 km/h

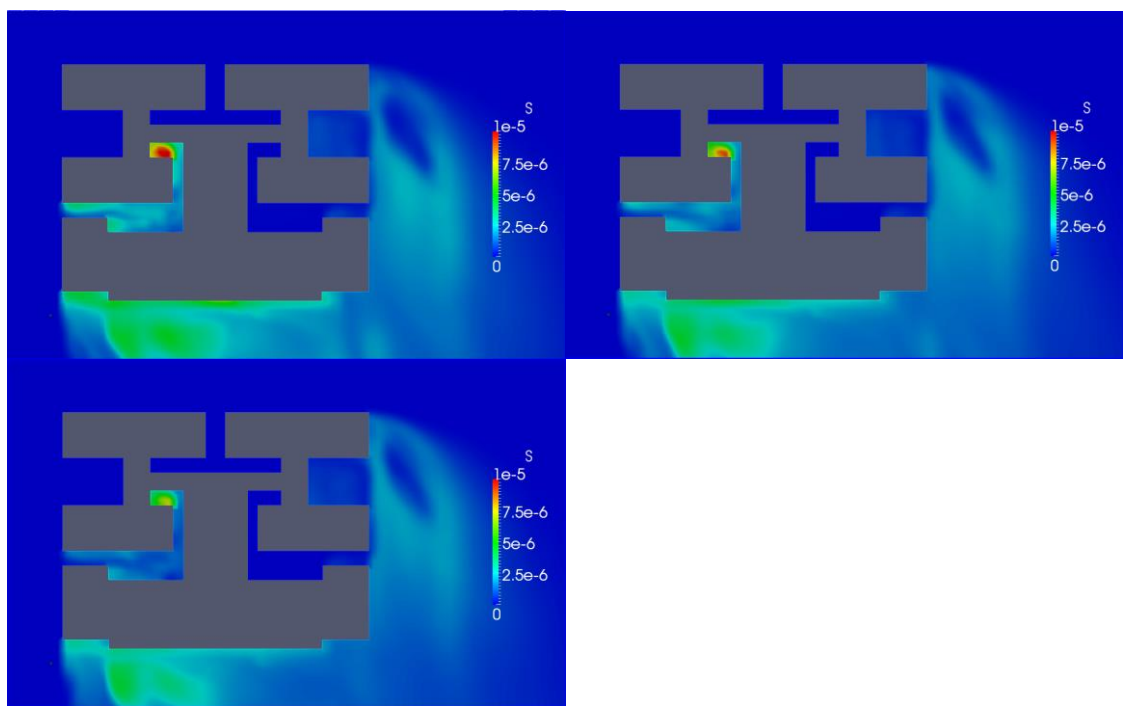


Figura V.36c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 20 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

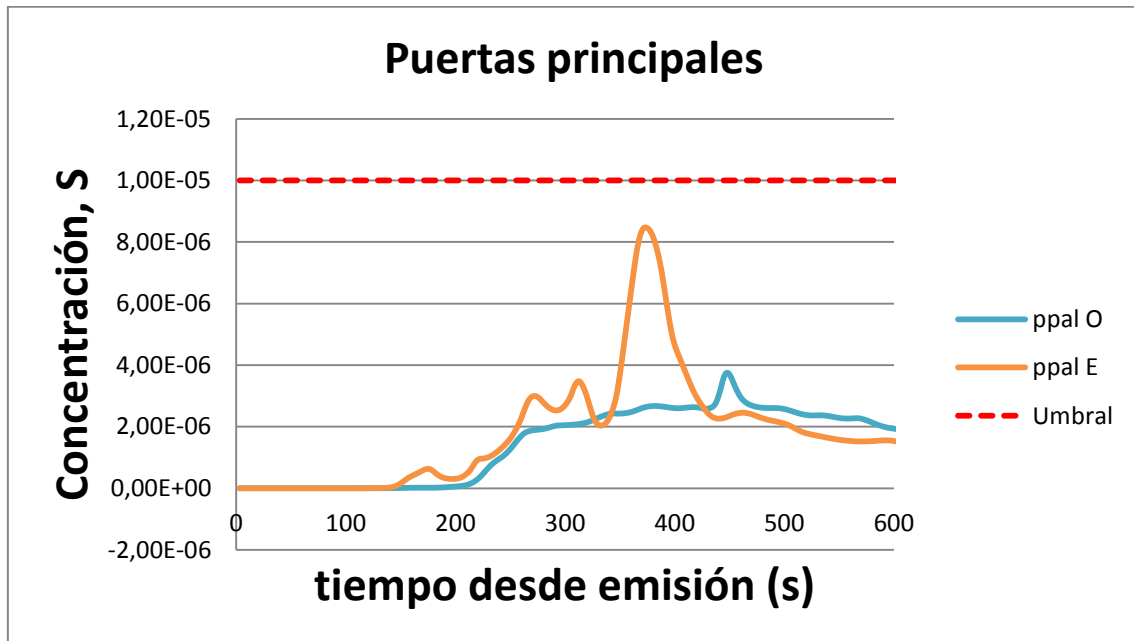


Figura V.37. Concentración en las puertas principales. Viento del N-NO a 20 km/h

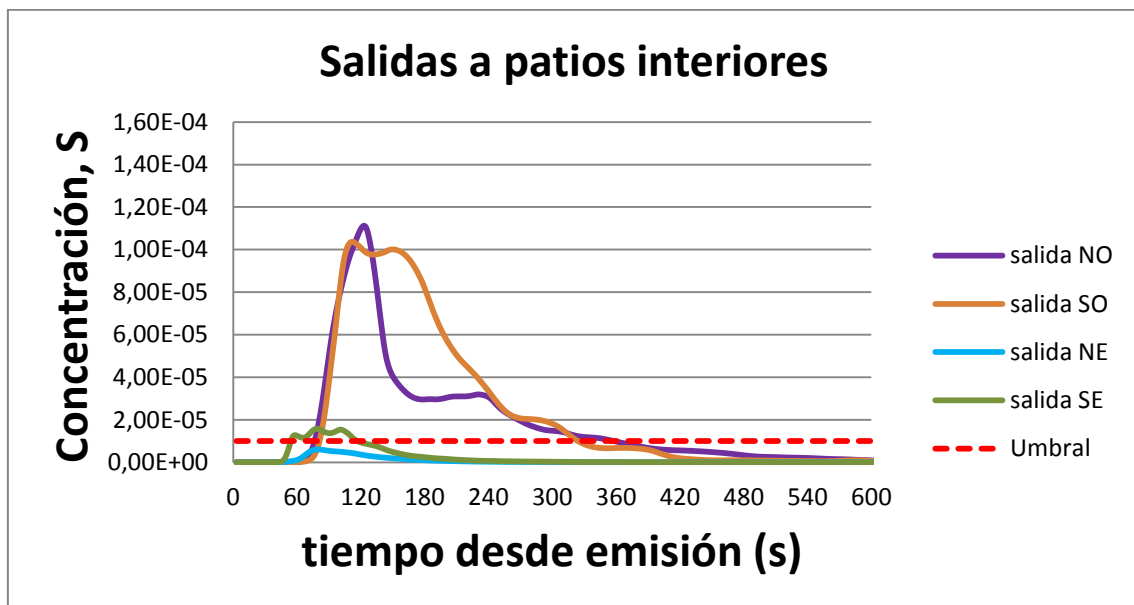


Figura V.38. Concentración en las salidas interiores. Viento del N-NO a 20 km/h

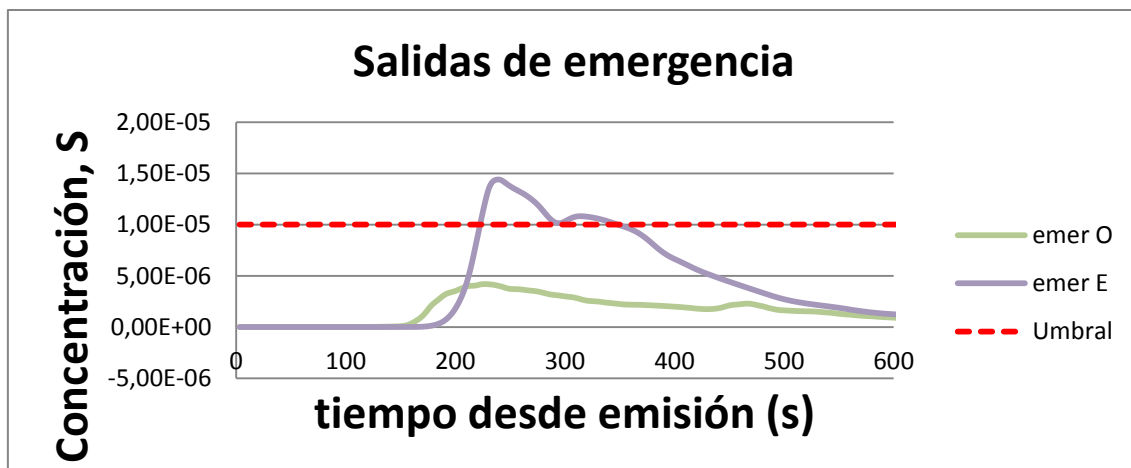


Figura V.39. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del N-NO a 20 km/h

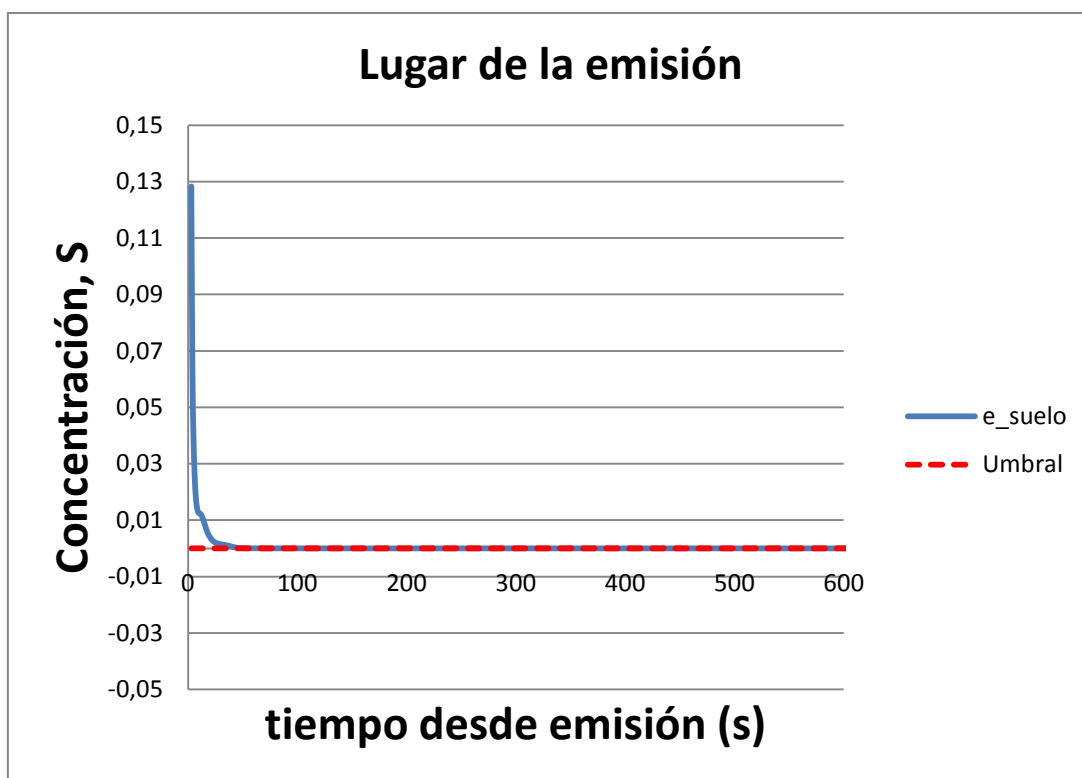


Figura V.40. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del N-NO a 20 km/h

## 2.2.2 Viento a 25 km/h

### 1) Evolución del campo de concentraciones

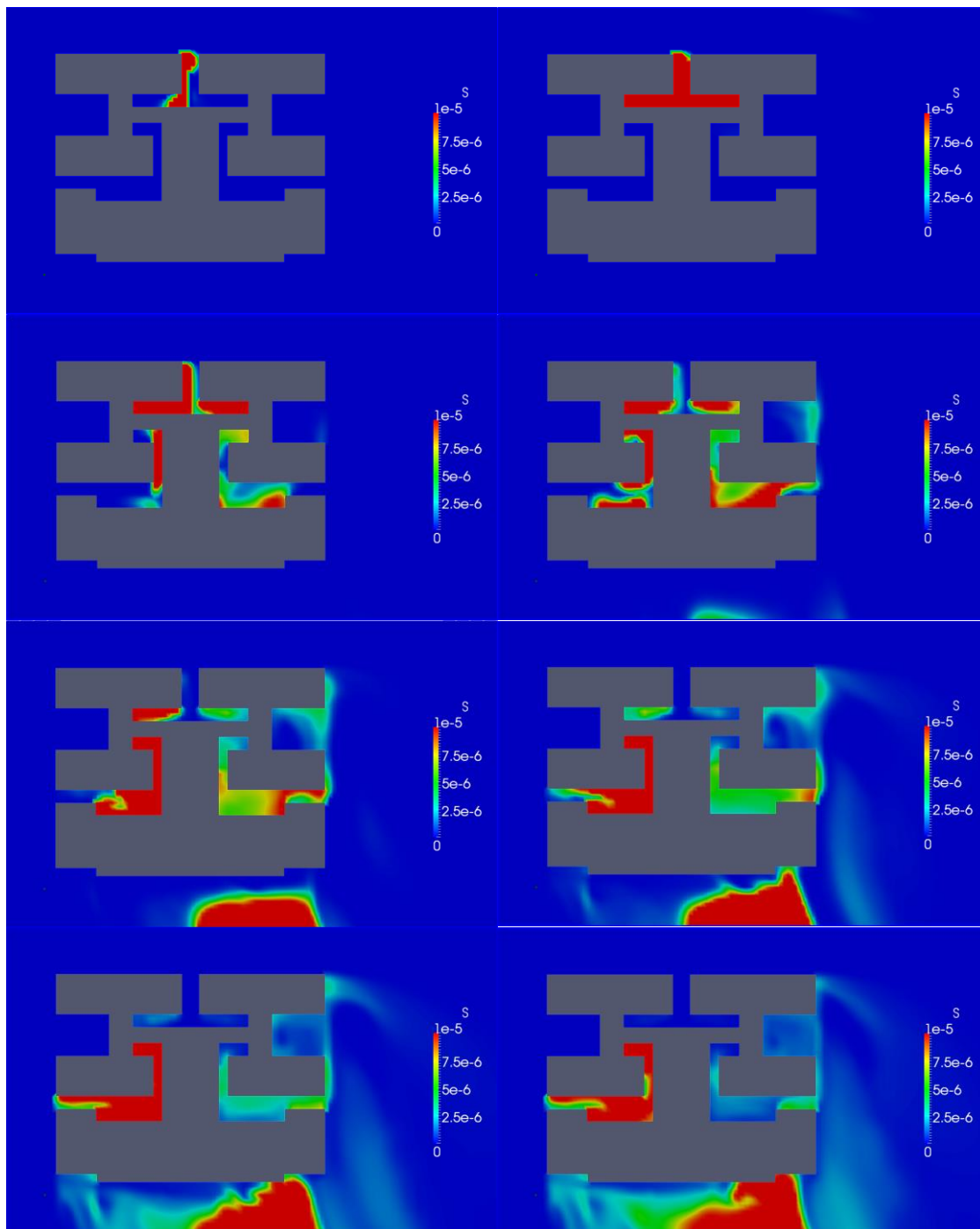


Figura V.42a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 25 km/h

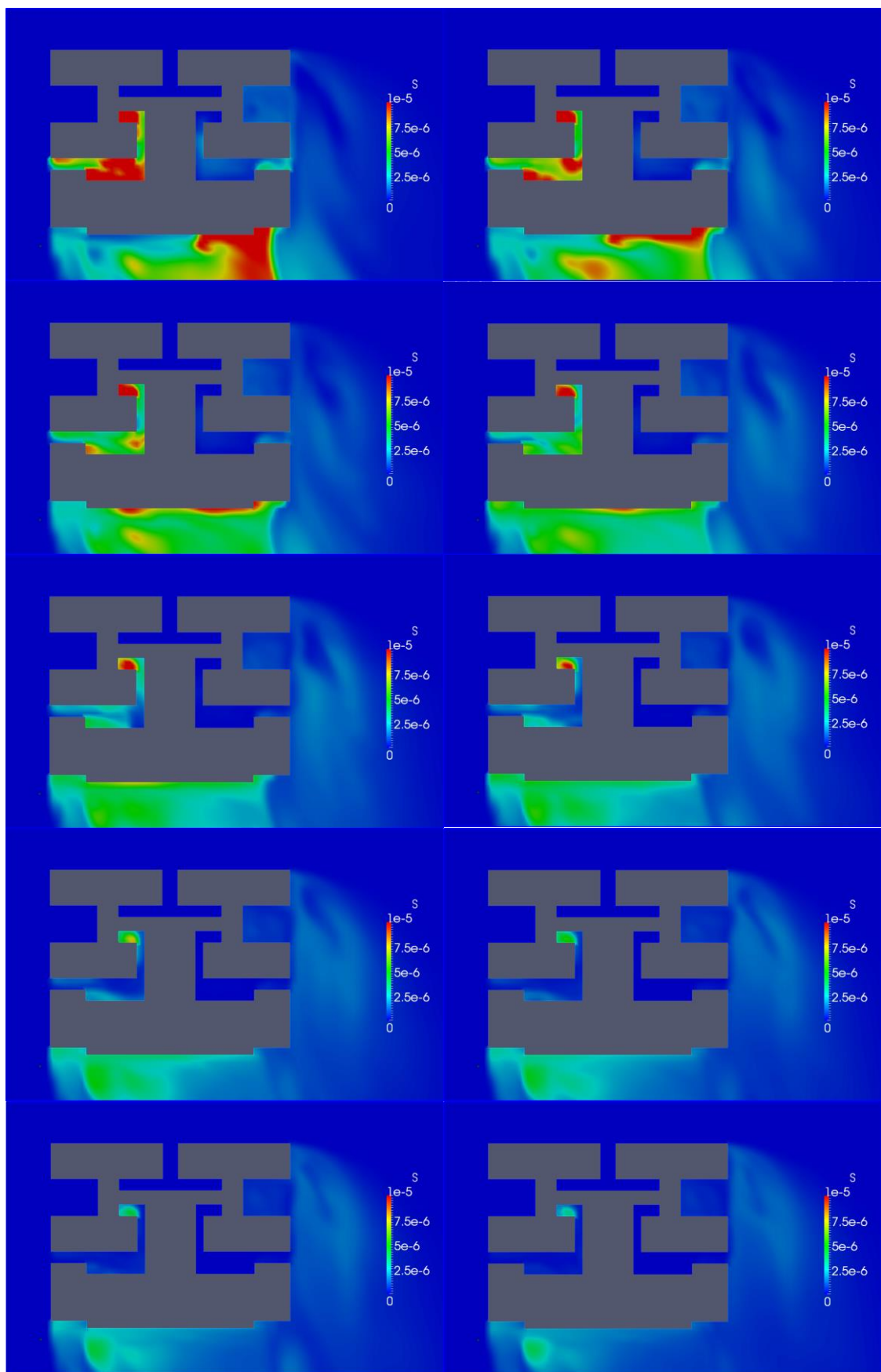


Figura V.42b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 25 km/h

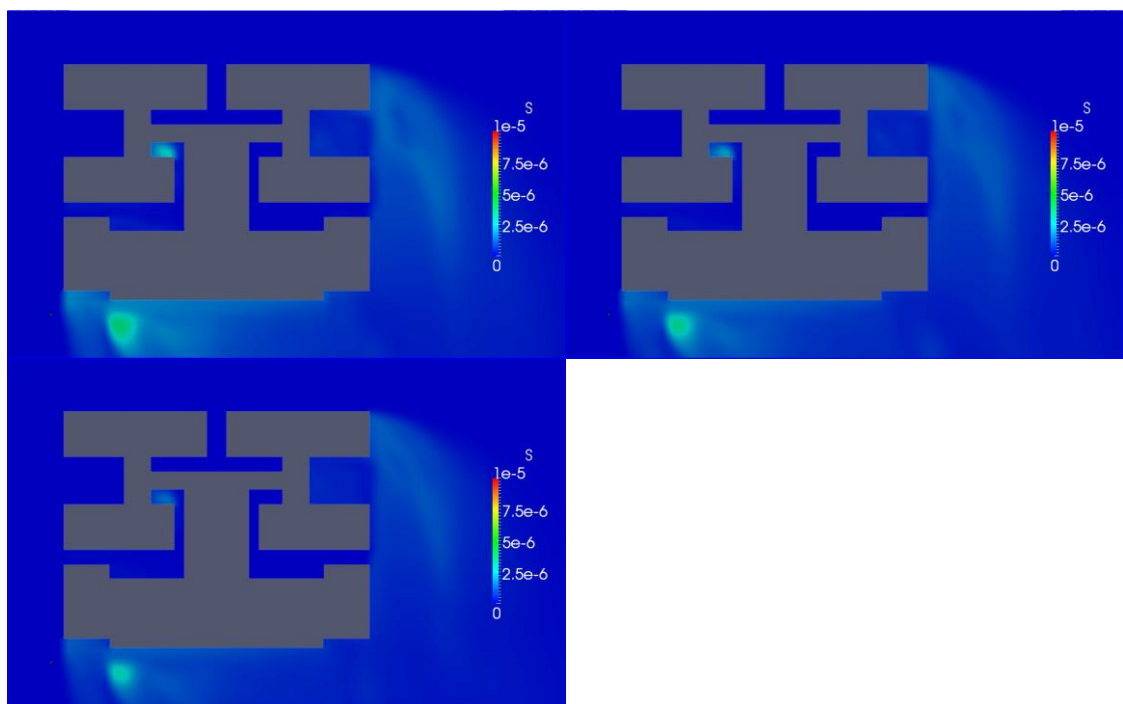


Figura V.42c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 25 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

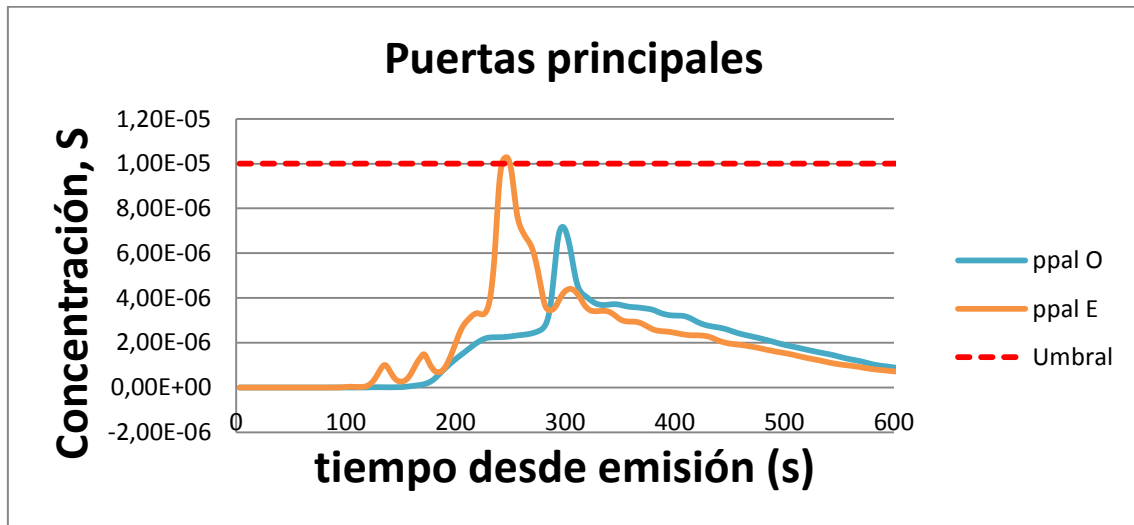


Figura V.43. Concentración en las puertas principales. Viento del N-NO a 25 km/h

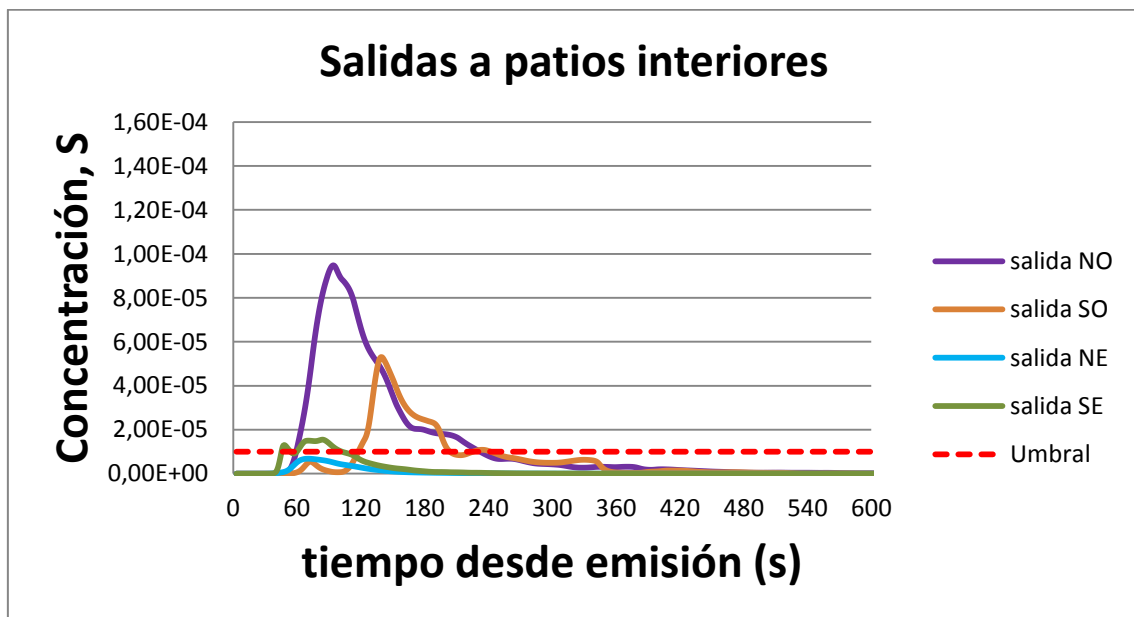


Figura V.44. Concentración en las salidas interiores. Viento del N-NO a 25 km/h



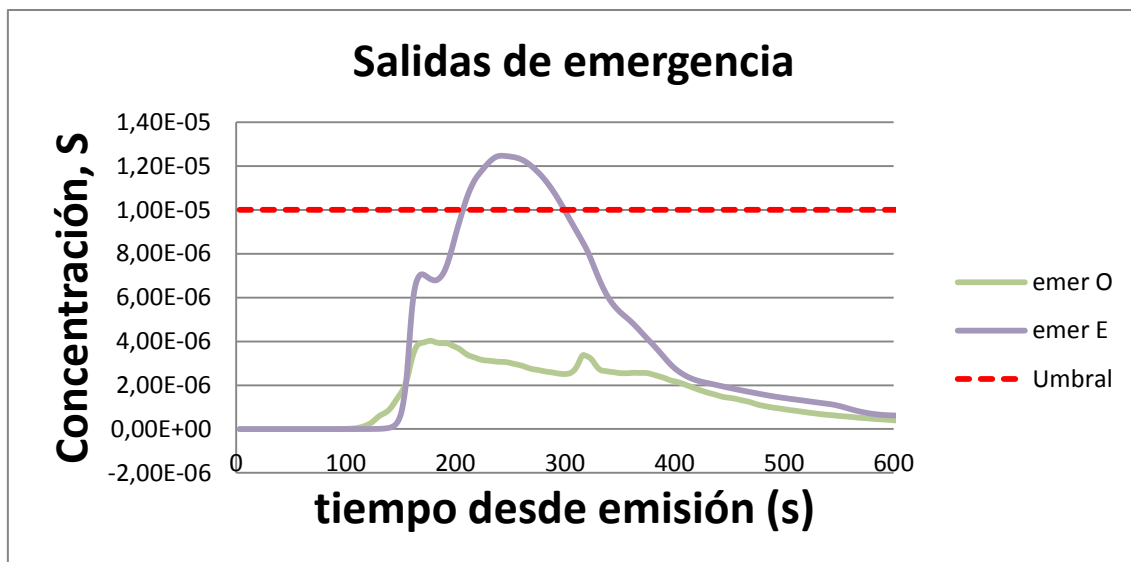


Figura V.45. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del N-NO a 25 km/h

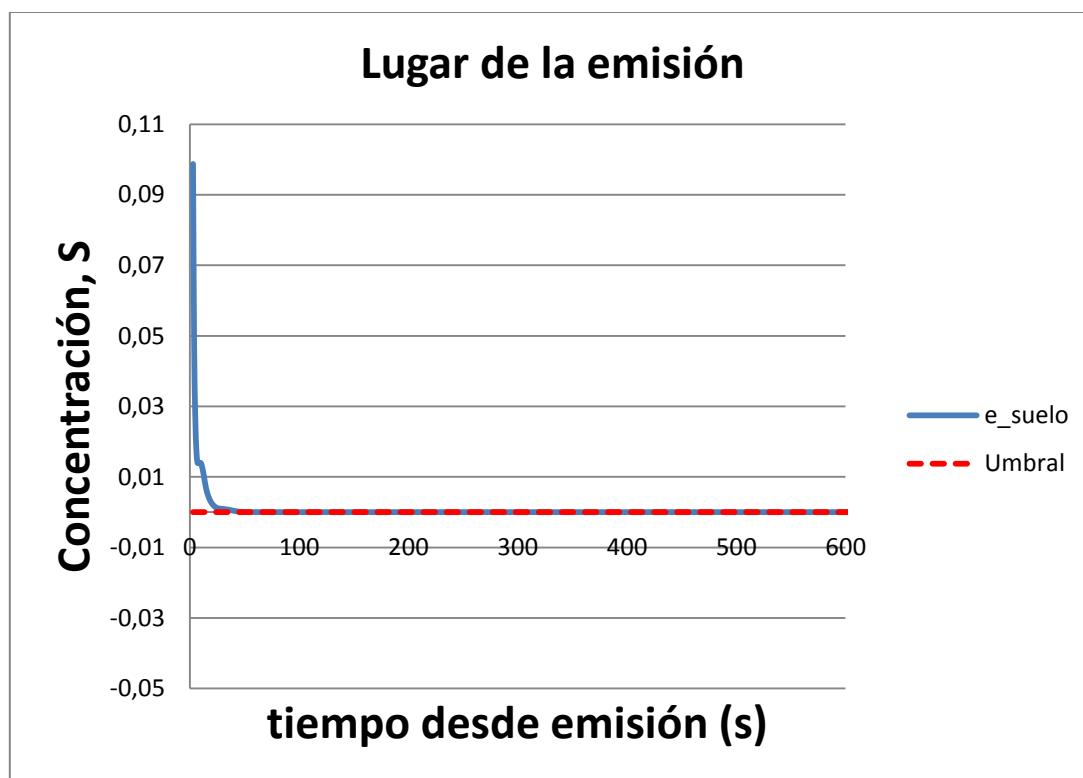


Figura V.46. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del N-NO a 25 km/h

### 2.2.3 Viento a 30 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

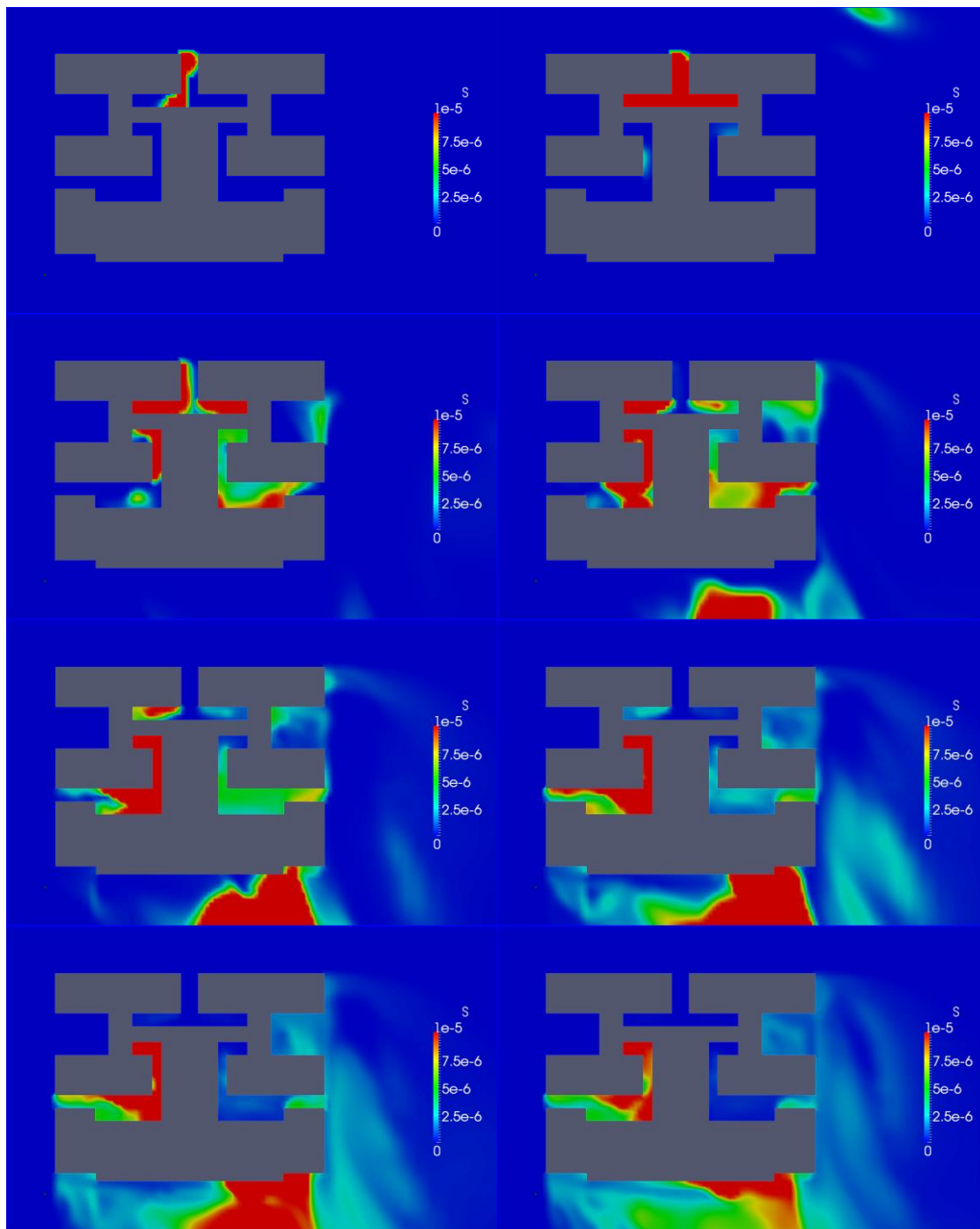


Figura V.48a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 30 km/h

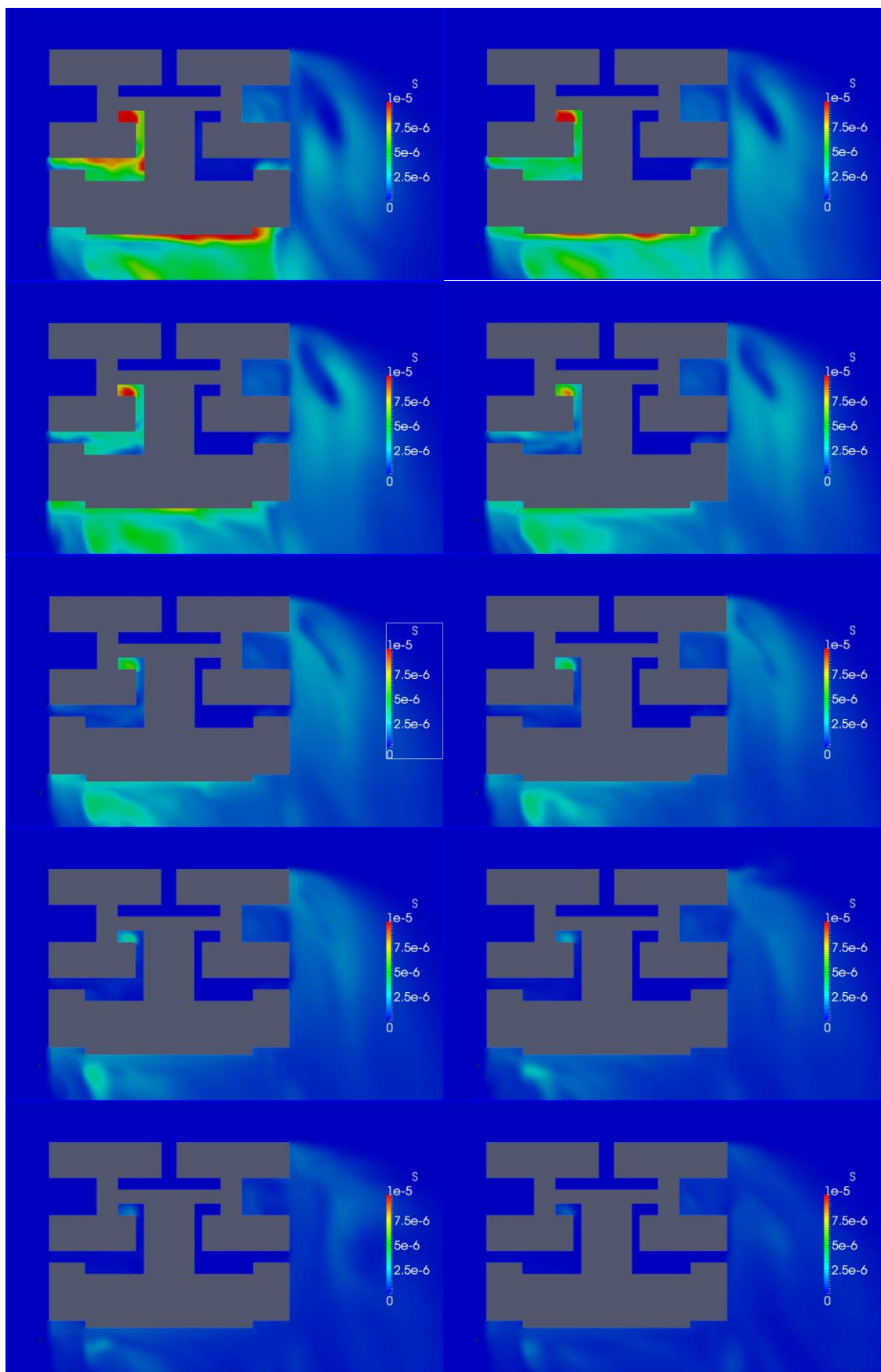


Figura V.48b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 30 km/h

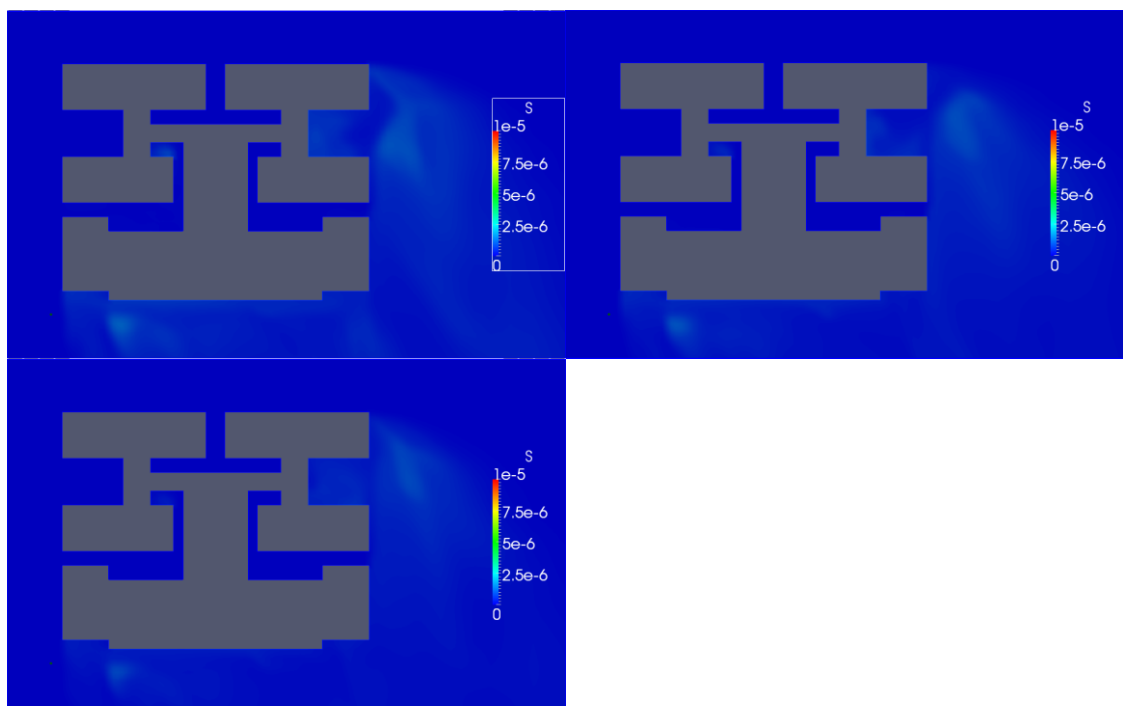


Figura V.48c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 30 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

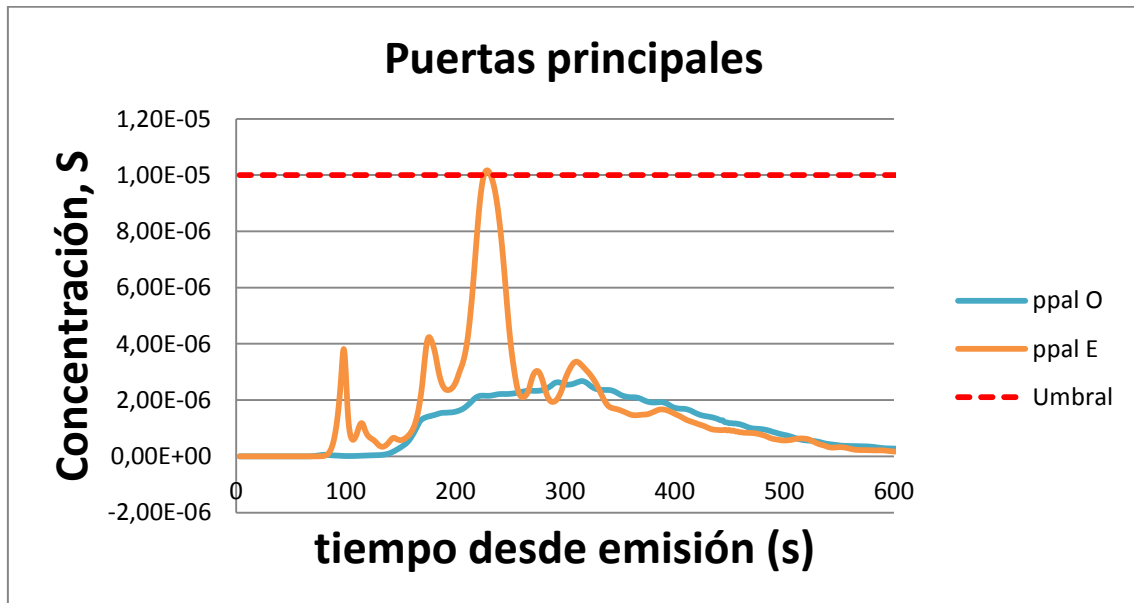


Figura V.49. Concentración en las puertas principales. Viento del N-NO a 30 km/h

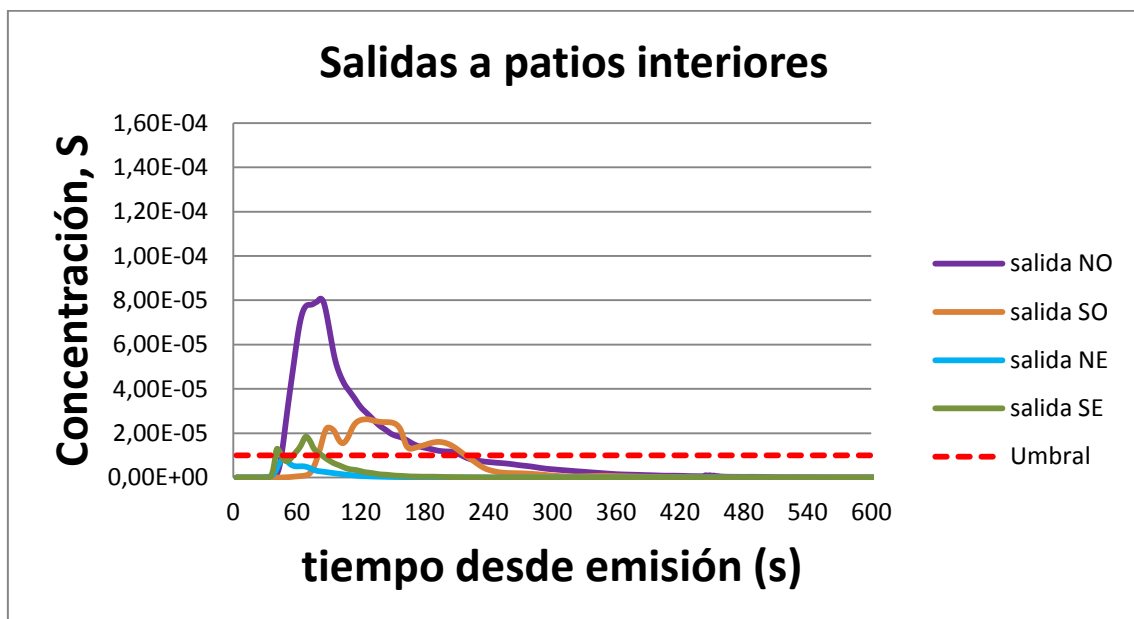


Figura V.50. Concentración en las salidas interiores. Viento del N-NO a 30 km/h

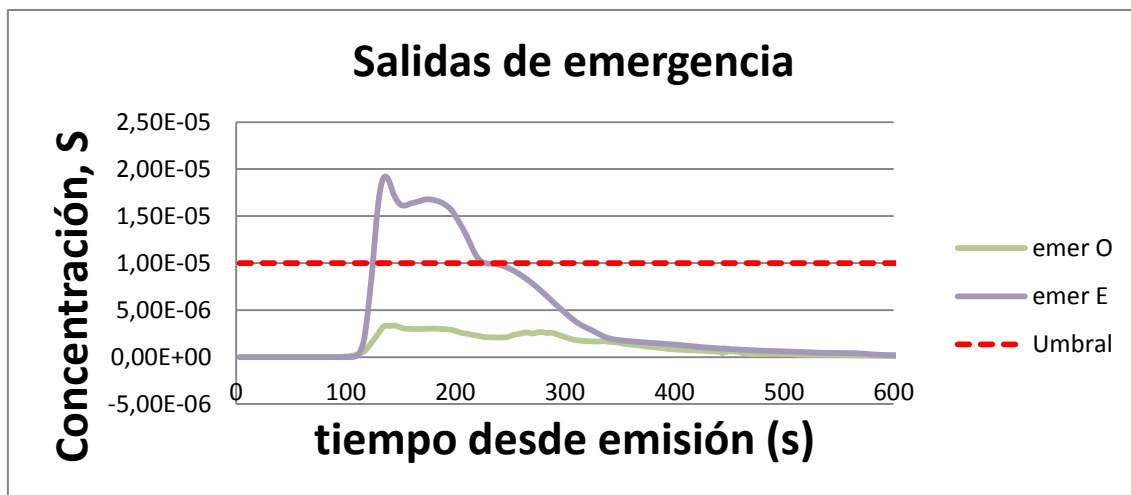


Figura V.51. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del N-NO a 30 km/h

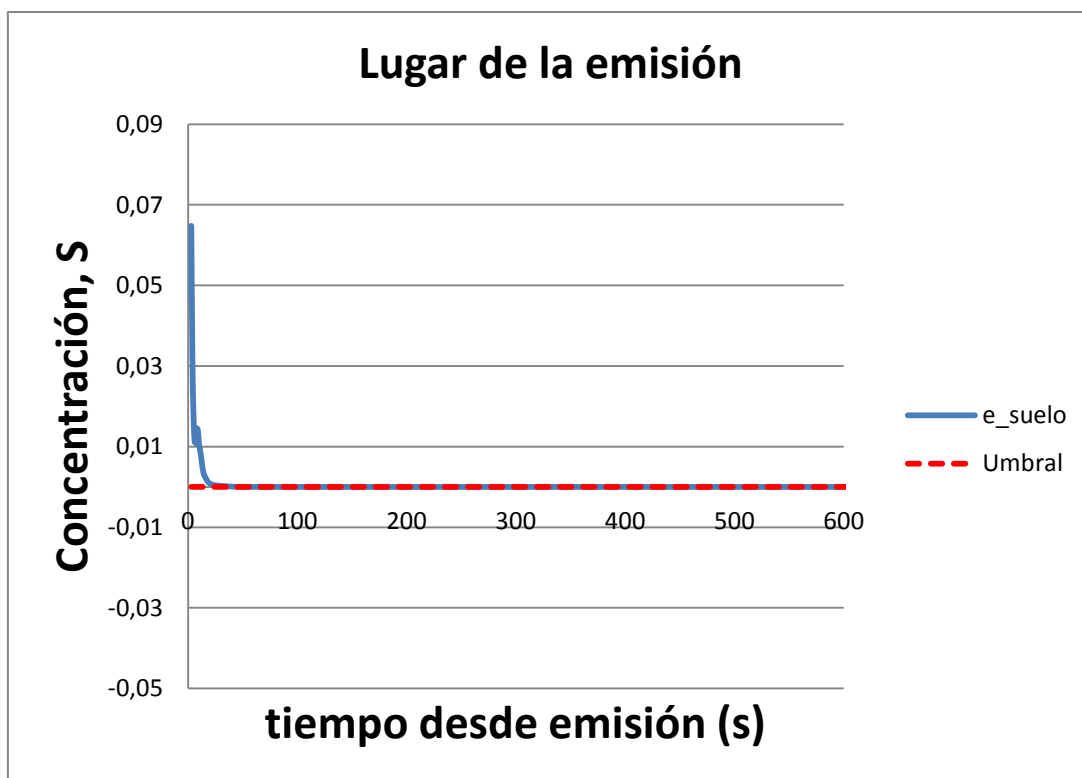


Figura V.52. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del N-NO a 30 km/h

## 2.2.4 Viento a 35 km/h

### 1) Evolución del campo de concentraciones

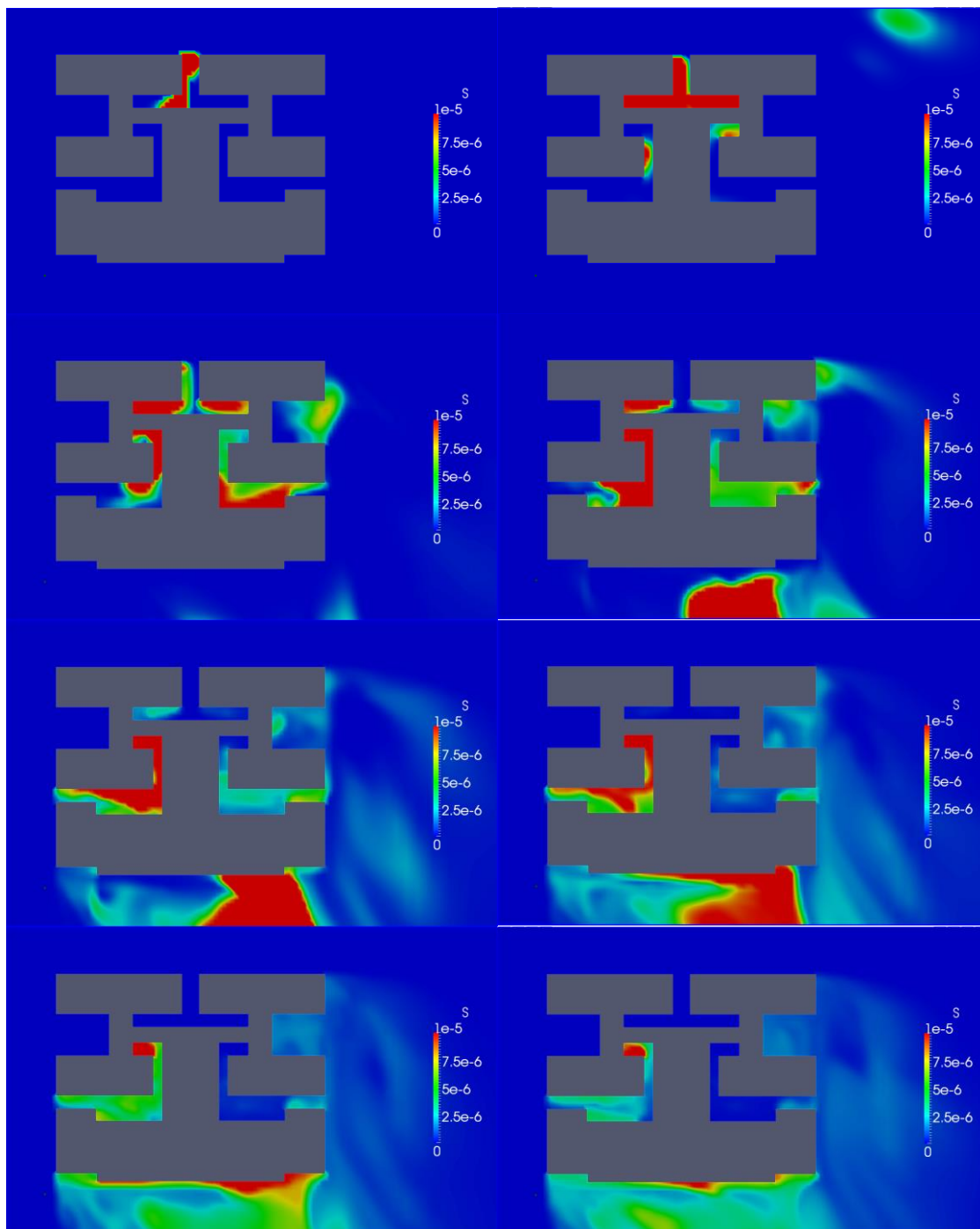


Figura V.54a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 35 km/h

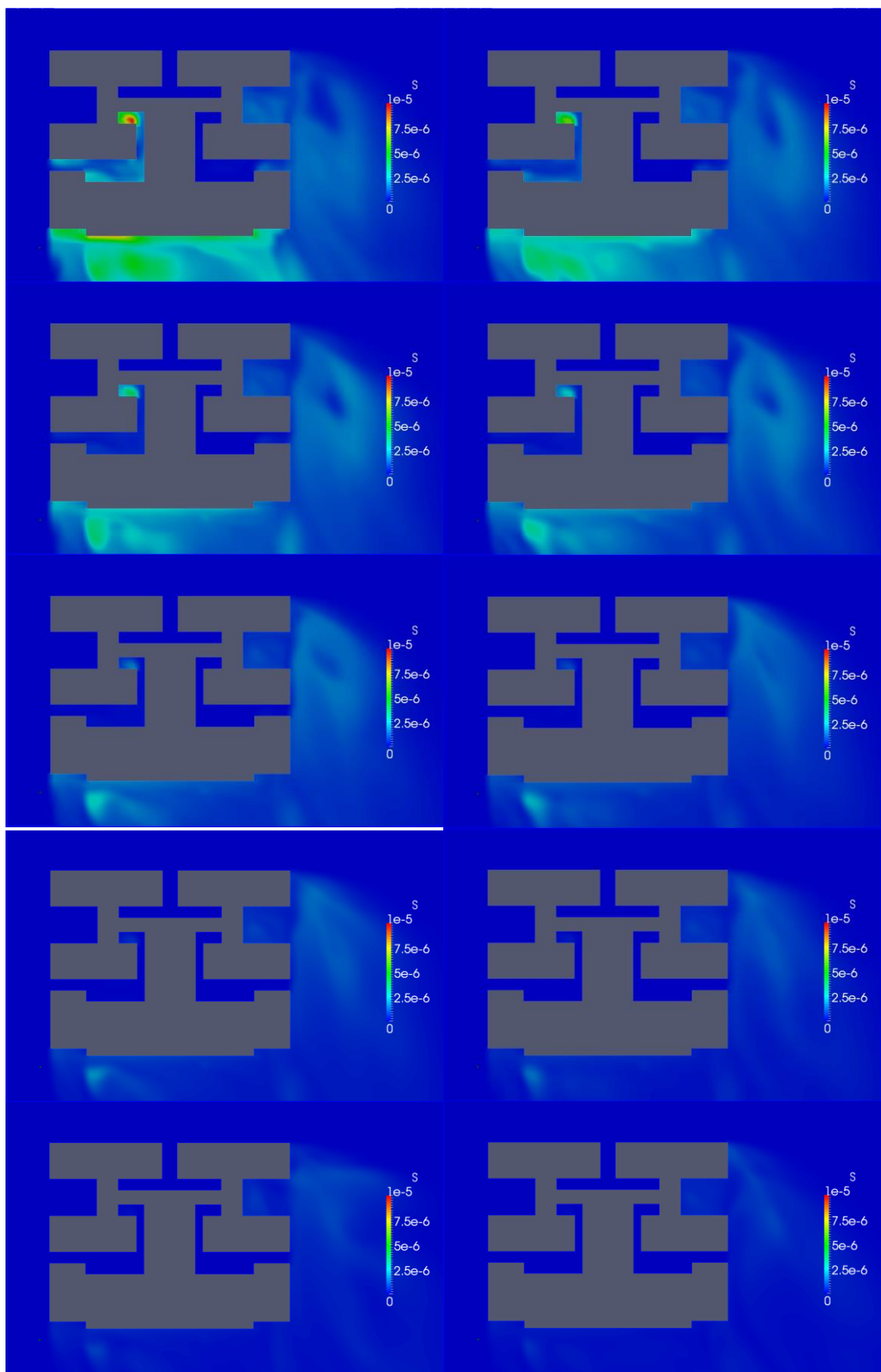


Figura V.54b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 35 km/h



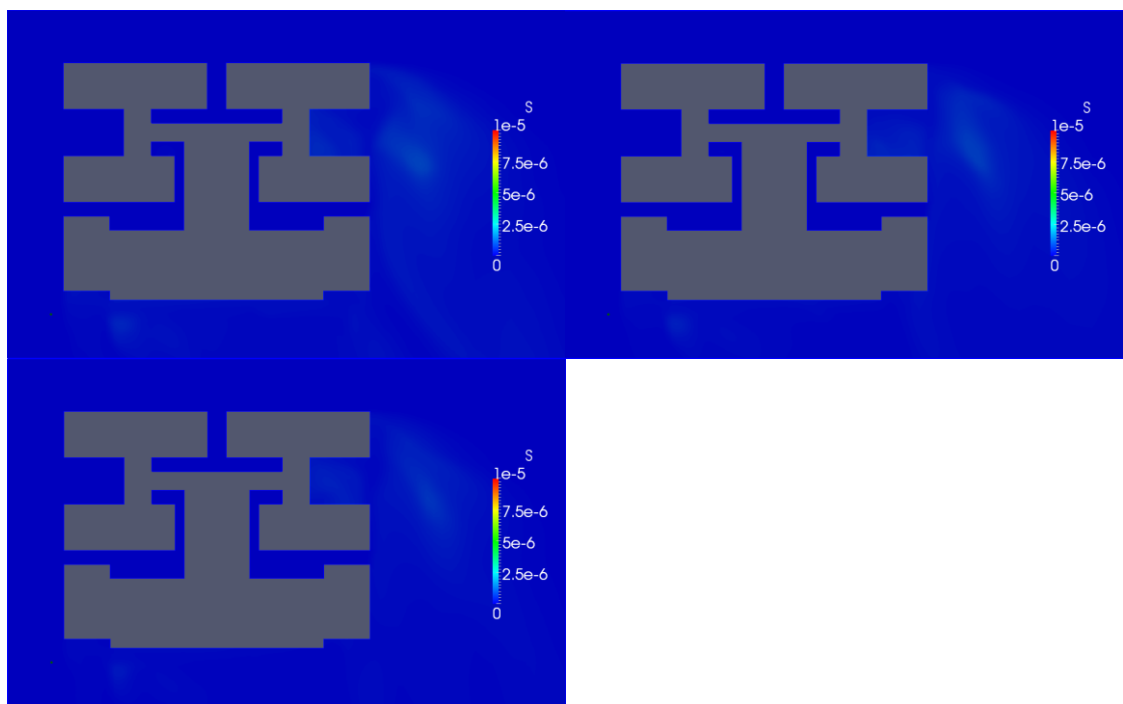


Figura V.54c. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 35 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

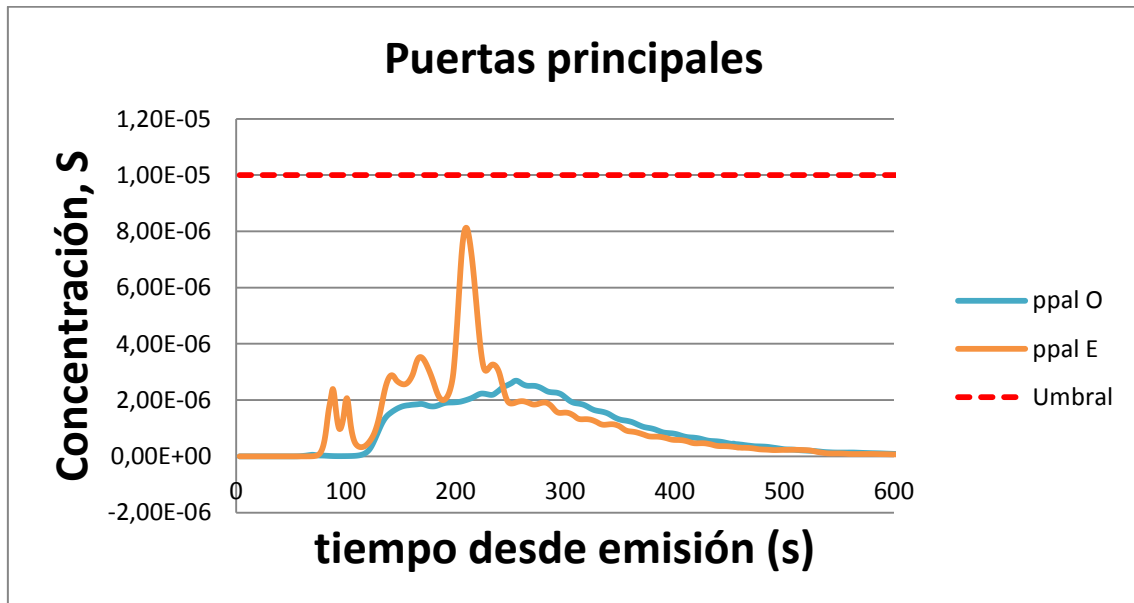


Figura V.55. Concentración en las puertas principales. Viento del N-NO a 35 km/h

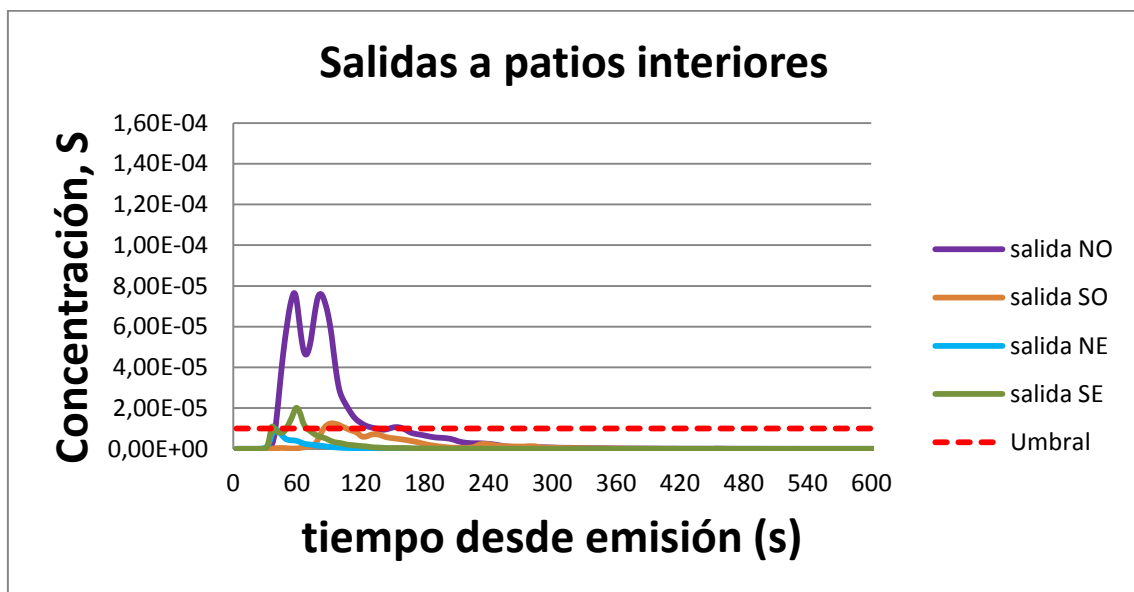


Figura V.56. Concentración en las salidas interiores. Viento del N-NO a 35 km/h

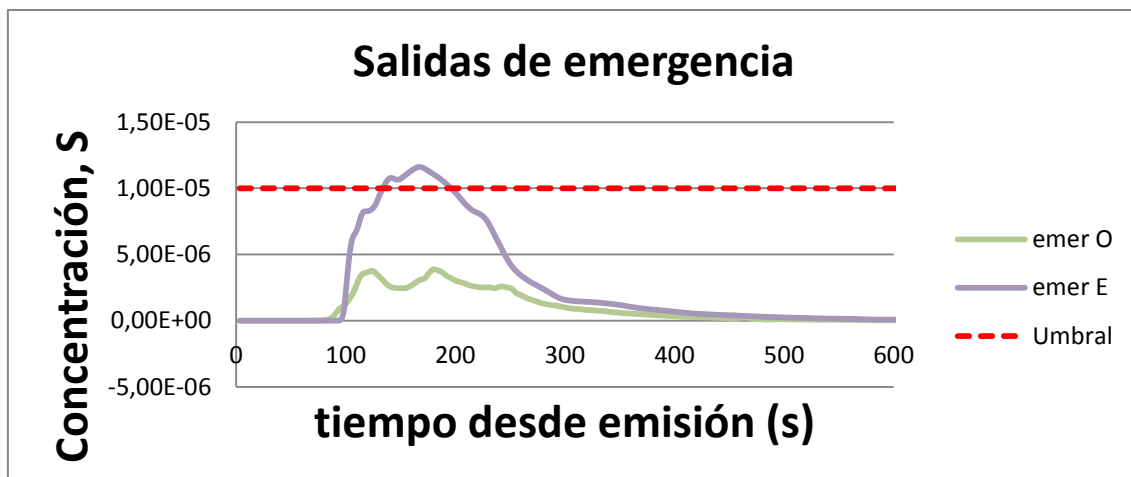


Figura V.57. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del N-NO a 35 km/h

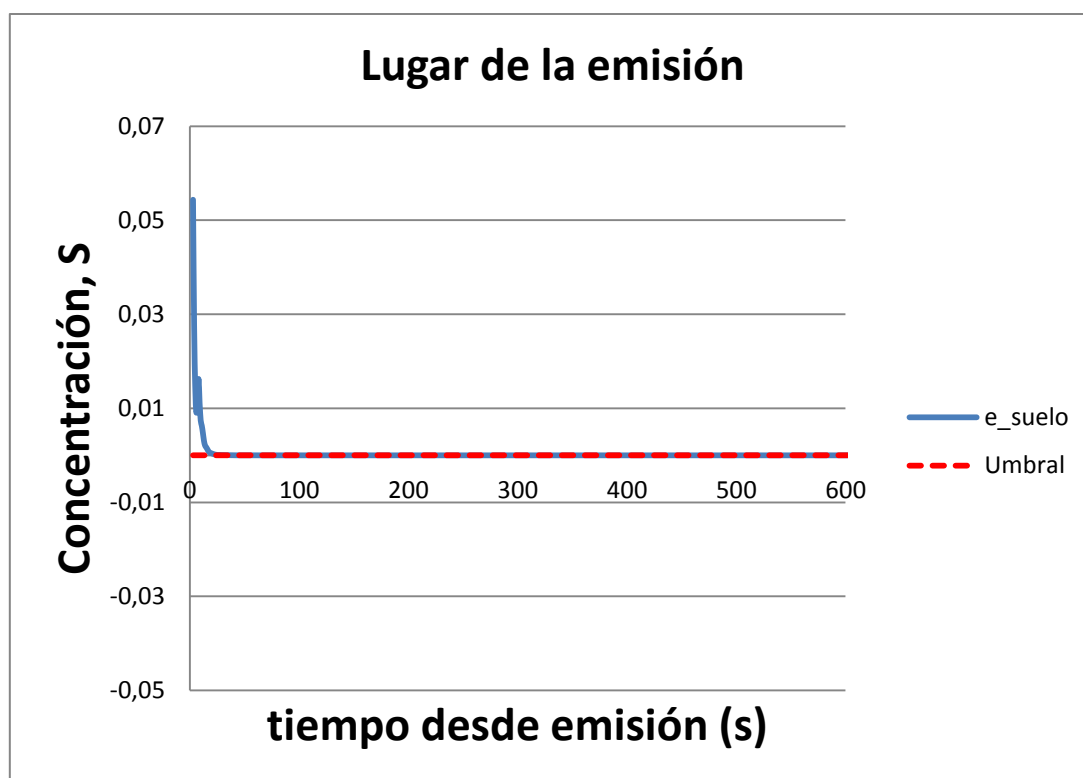


Figura V.58. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del N-NO a 35 km/h

## 2.2.5 Viento a 40 km/h

### 1) Evolución del campo de concentraciones

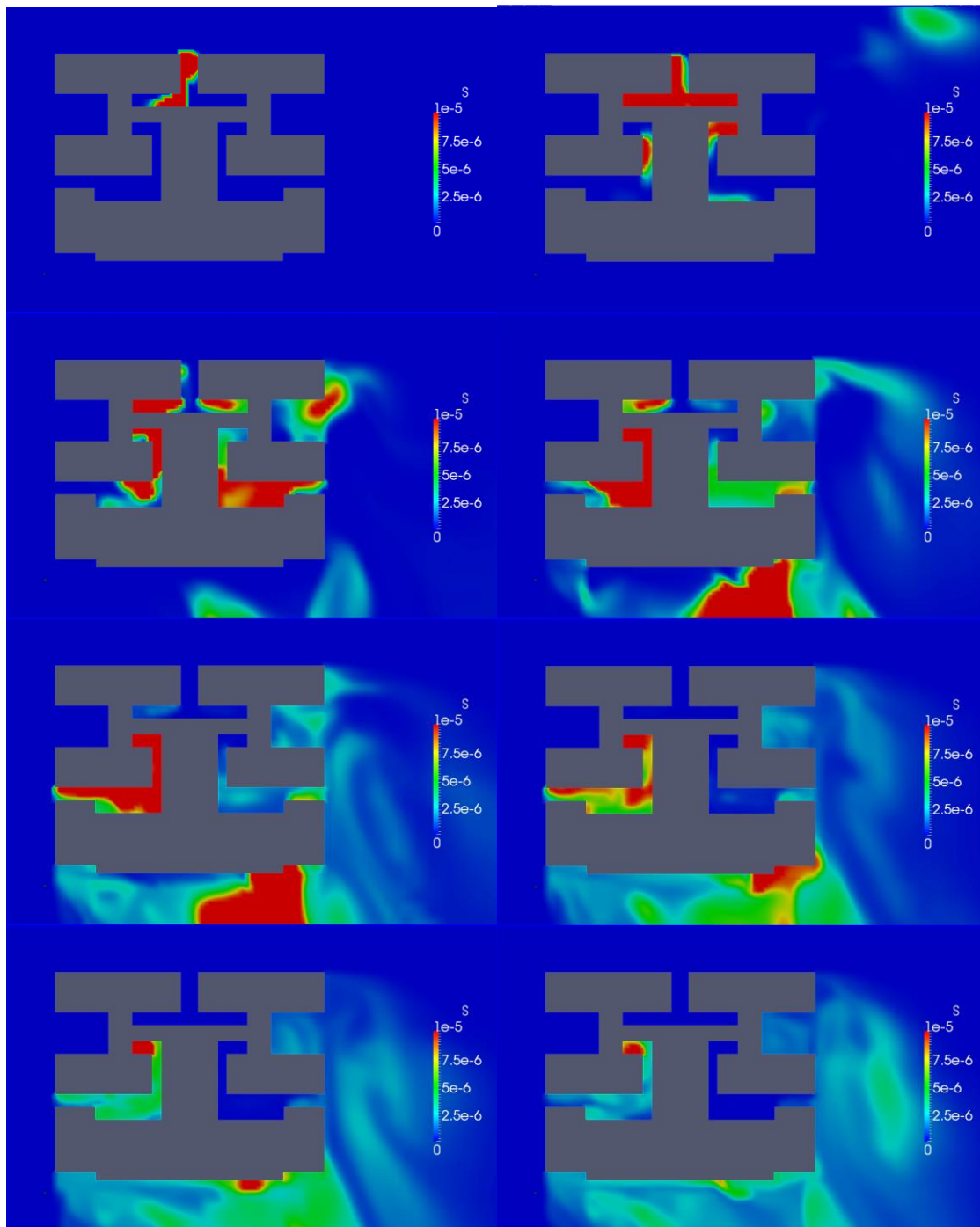


Figura V.60a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 40 km/h

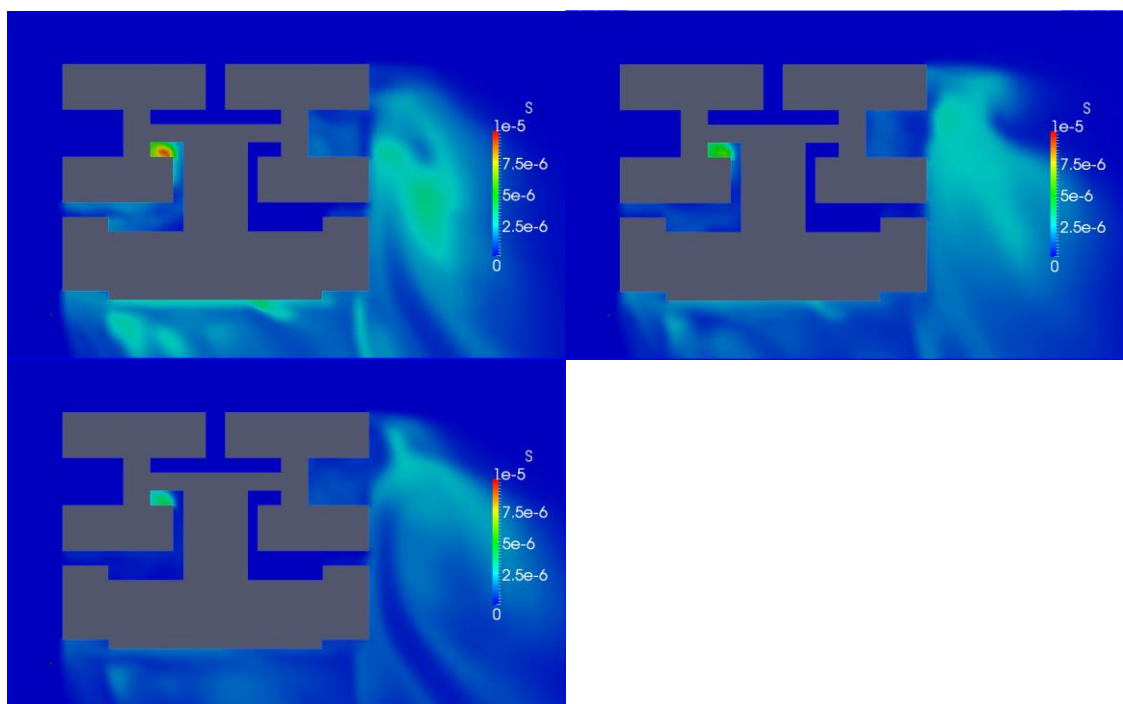


Figura V.60b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del N-NO a 40 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

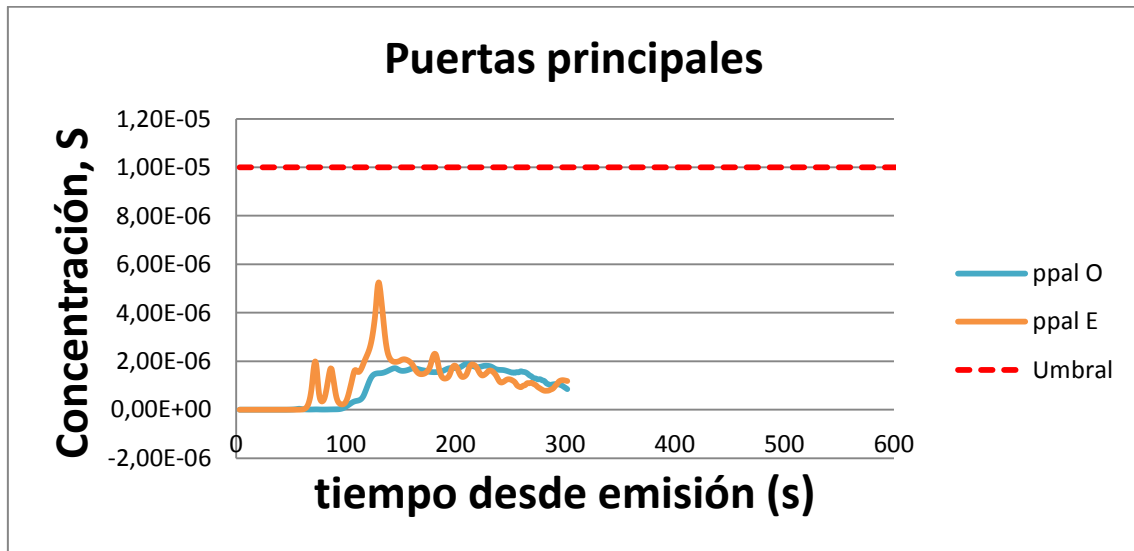


Figura V.61. Concentración en las puertas principales. Viento del N-NO a 40 km/h

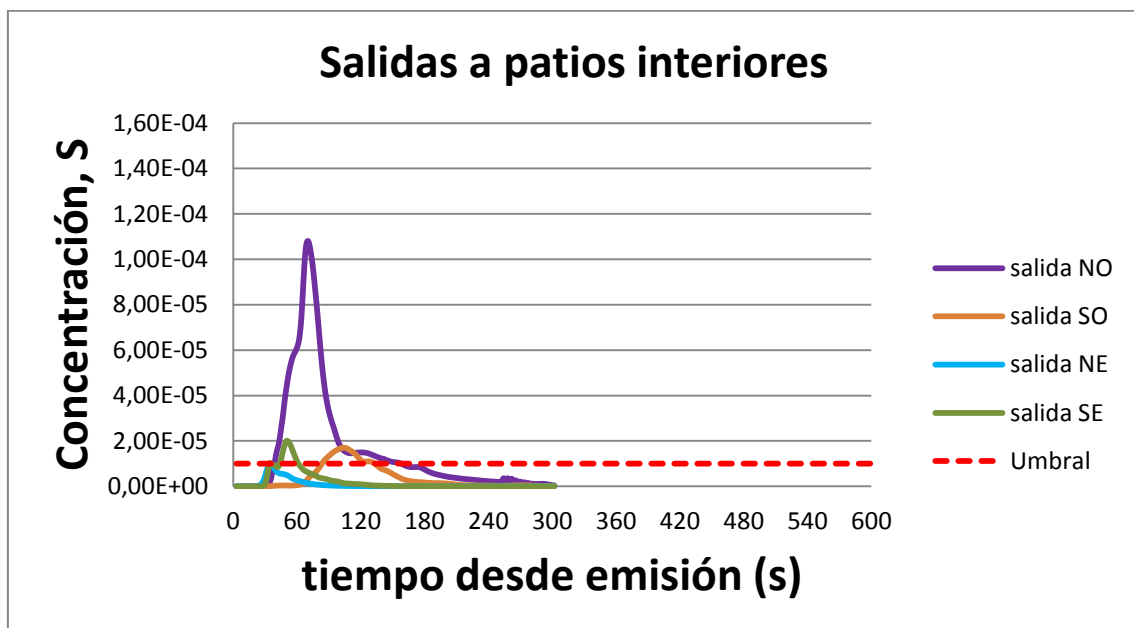


Figura V.62. Concentración en las salidas interiores. Viento del N-NO a 40 km/h

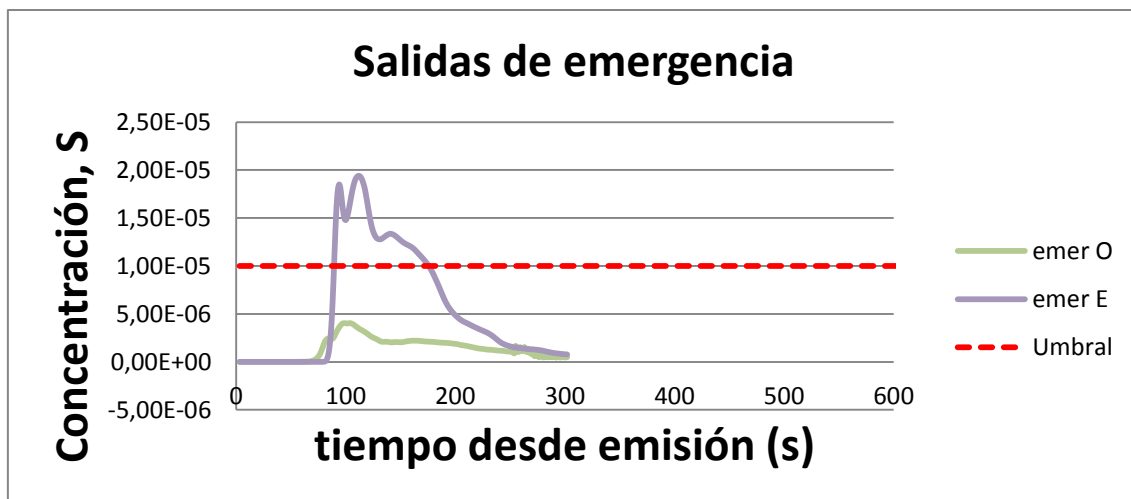


Figura V.63. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del N-NO a 40 km/h

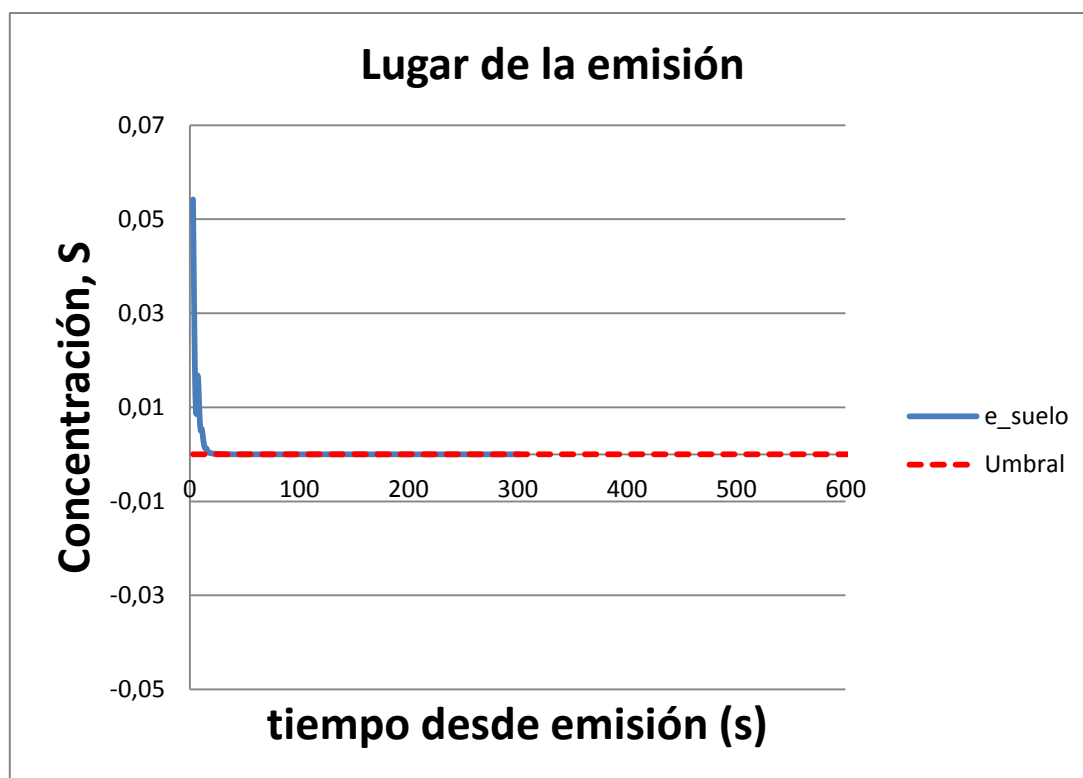


Figura V.64. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del N-NO a 40 km/h

## 2.3 Viento del O-NO

### 2.3.1 Viento a 20 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

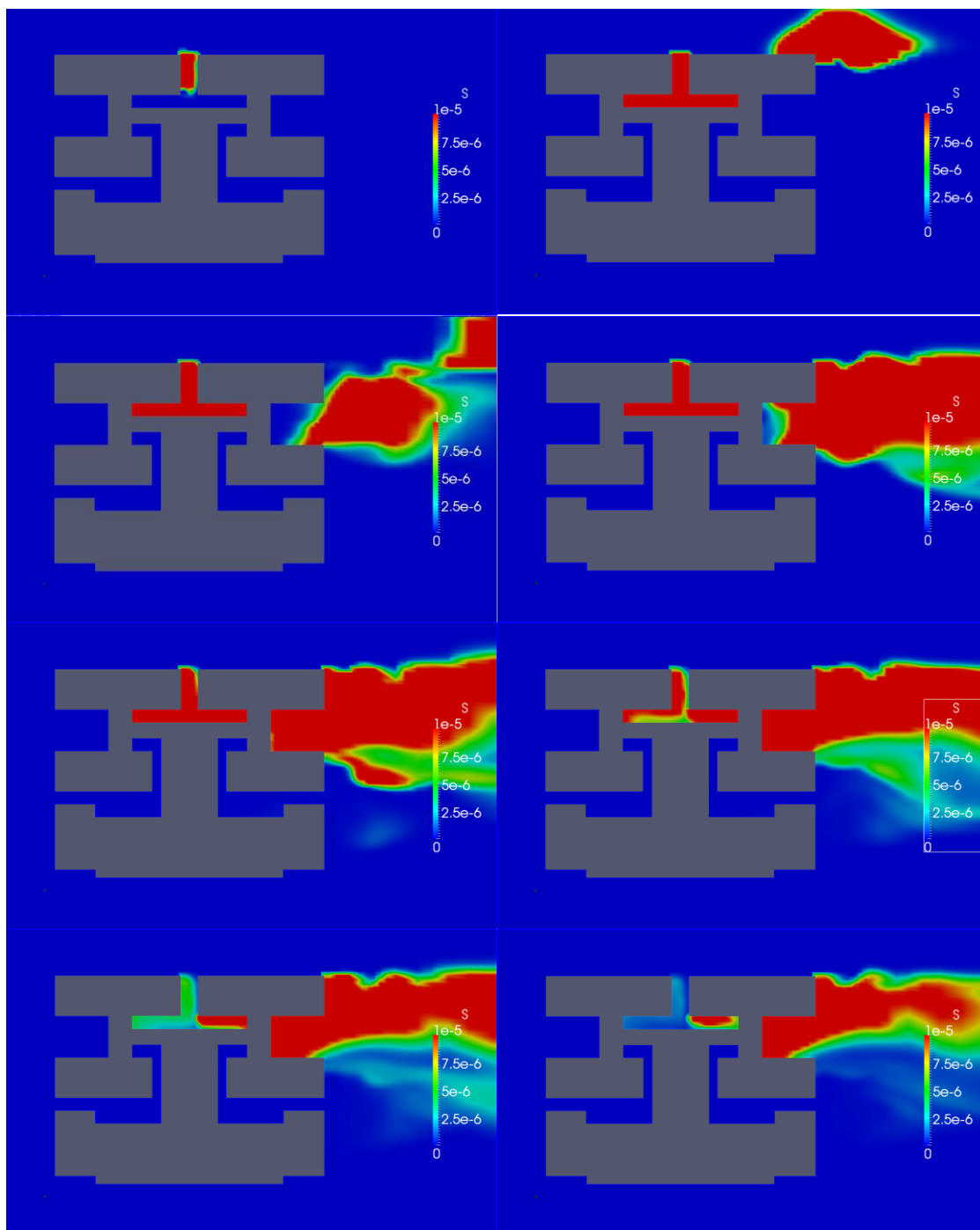


Figura V.66a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 20 km/h



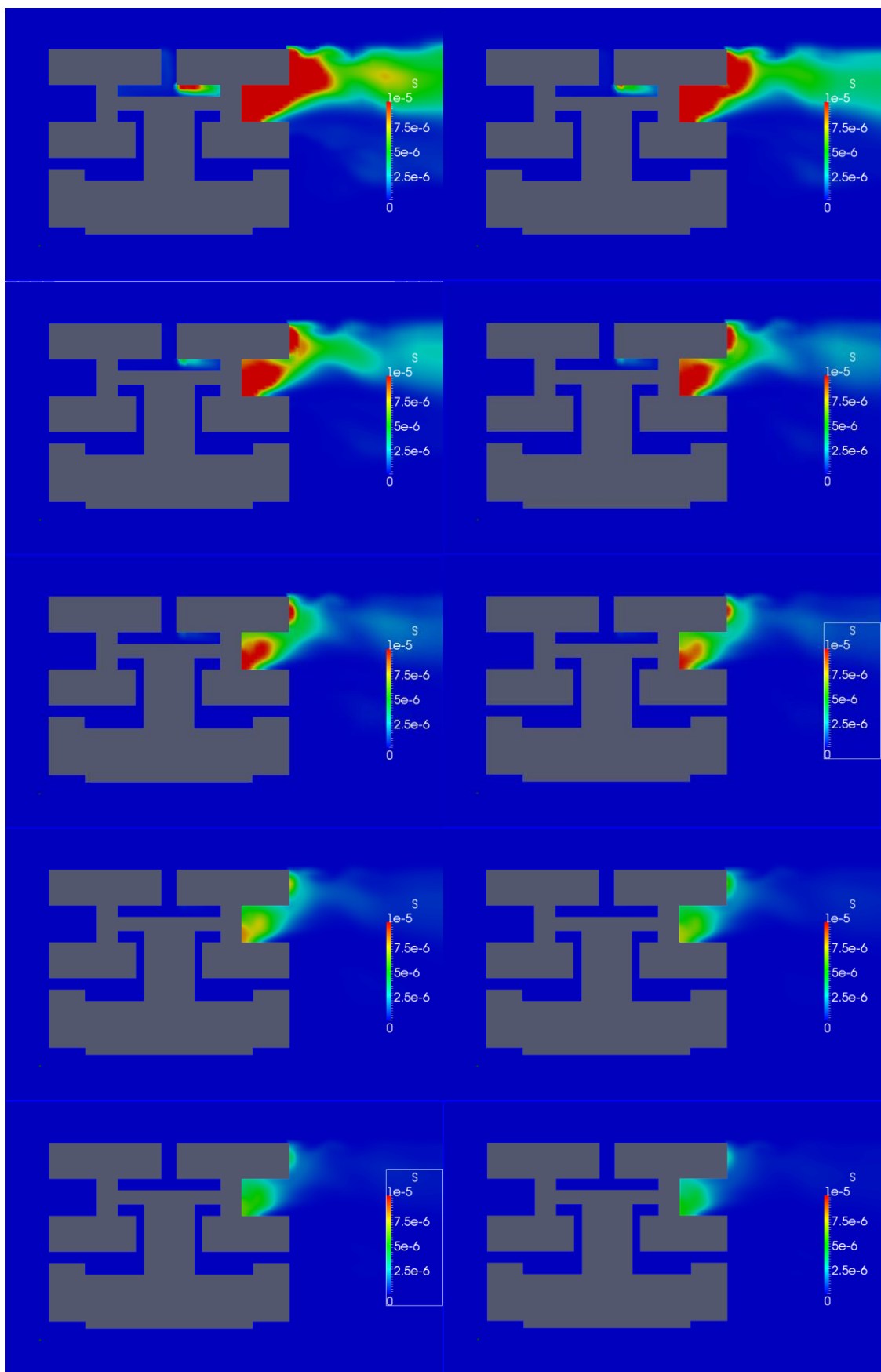


Figura V.66b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 20 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

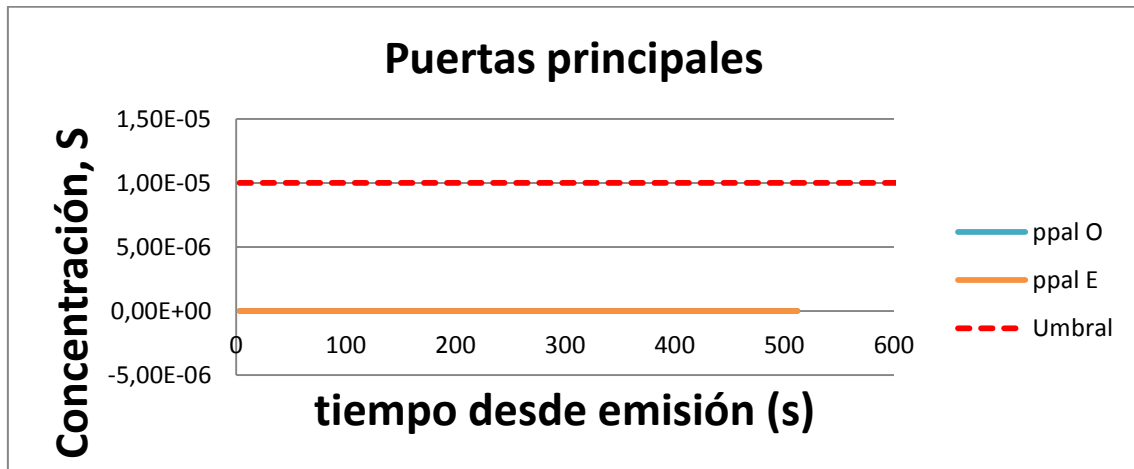


Figura V.67. Concentración en las puertas principales. Viento del O-NO a 20 km/h

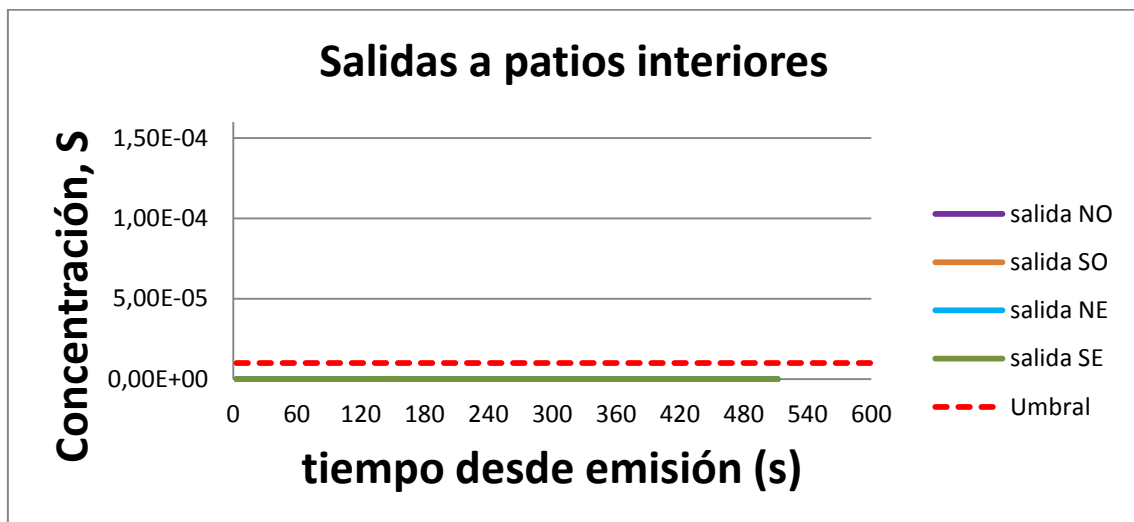


Figura V.68. Concentración en las salidas interiores. Viento del O-NO a 20 km/h

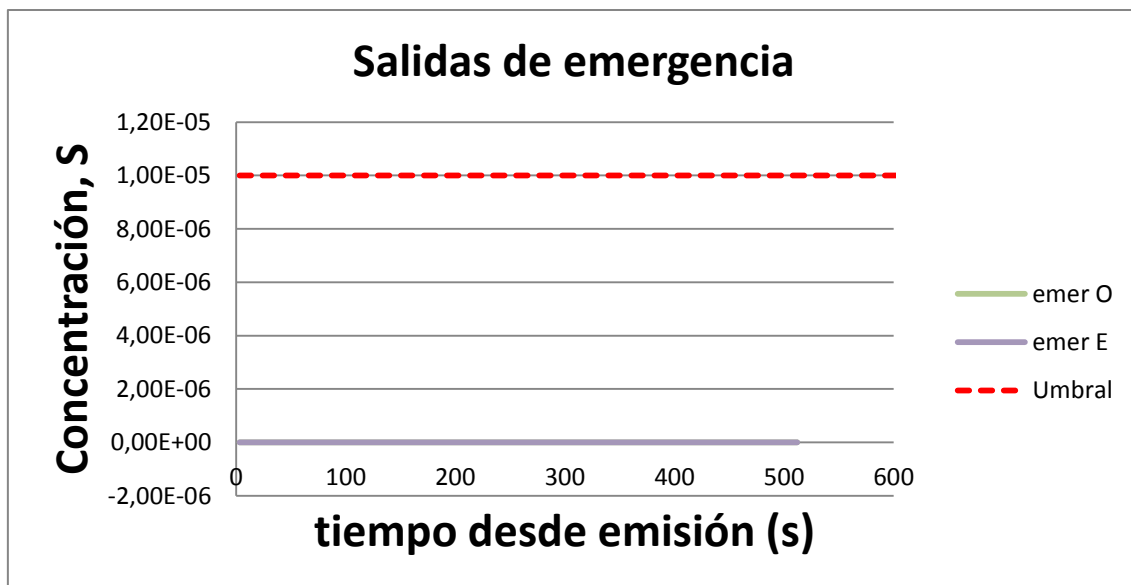


Figura V.69. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del O-NO a 20 km/h

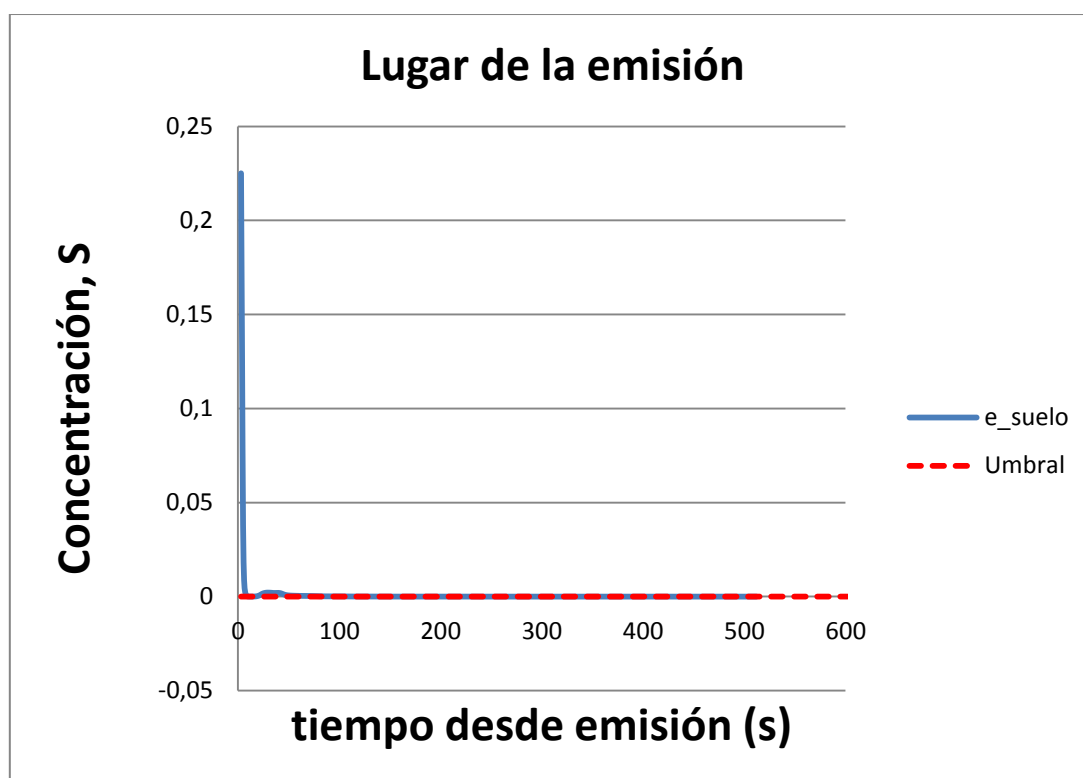


Figura V.70. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del O-NO a 20 km/h

### 2.3.2 Viento a 25 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

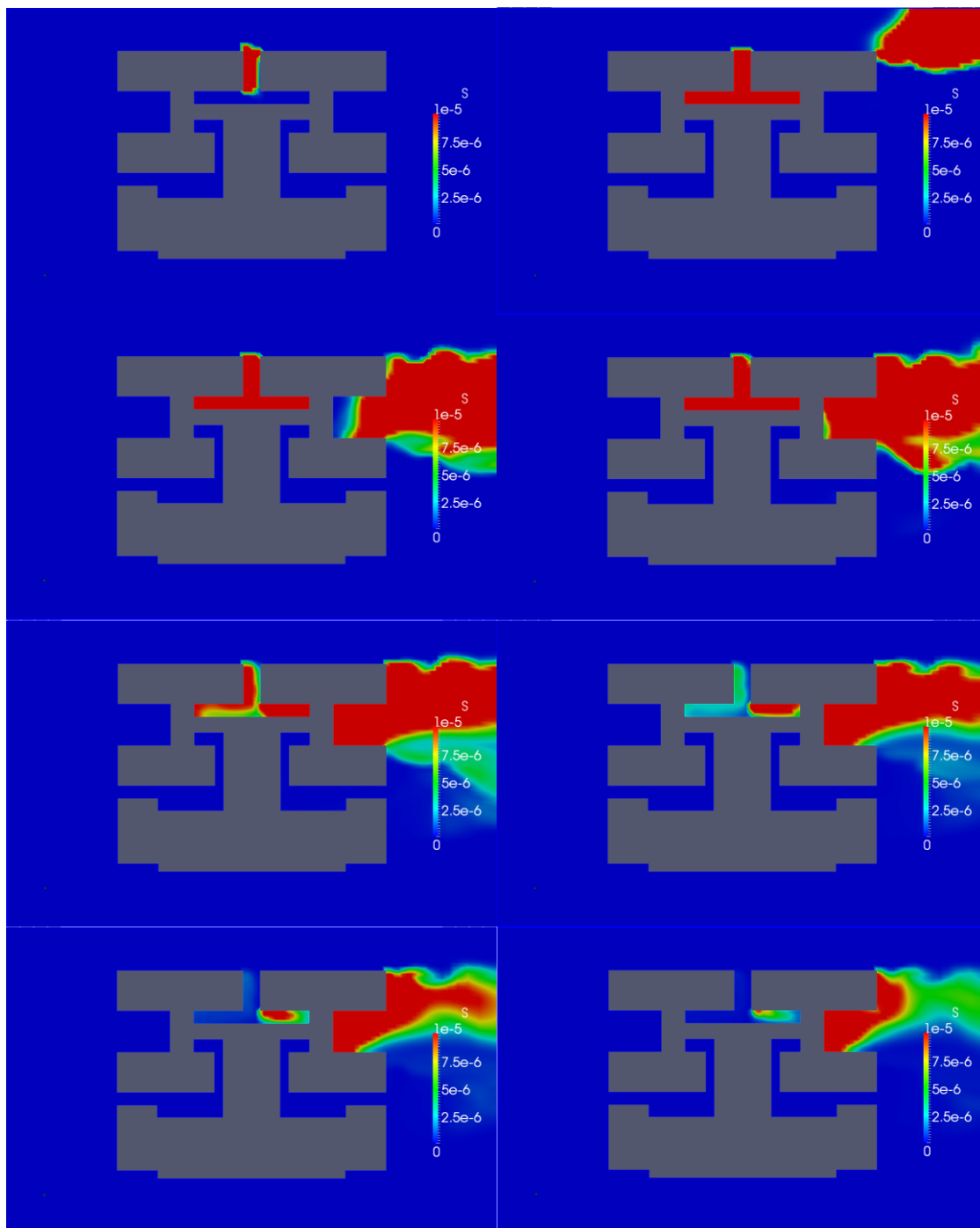


Figura V.72a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 25 km/h

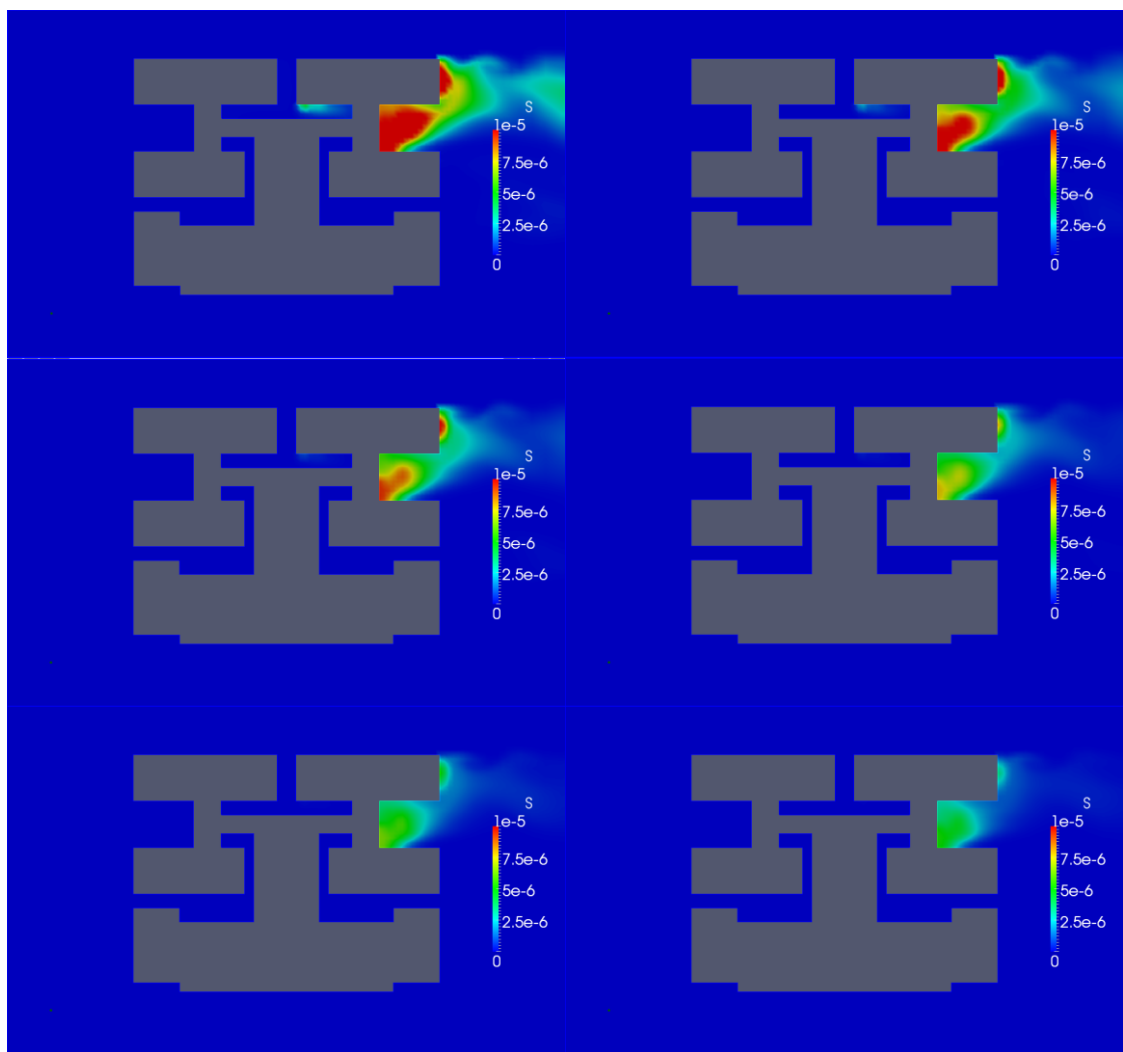


Figura V.72b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 25 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

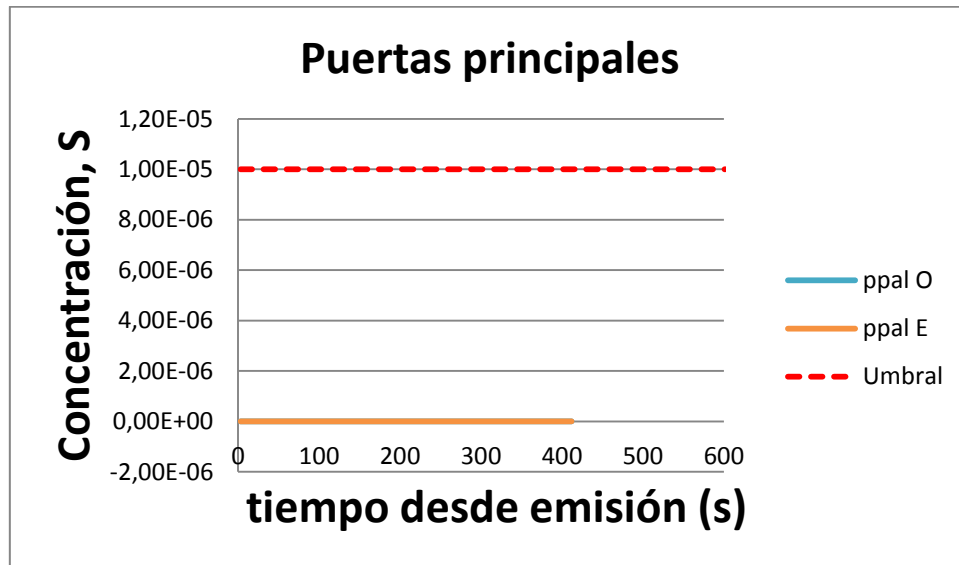


Figura V.73. Concentración en las puertas principales. Viento del O-NO a 25 km/h

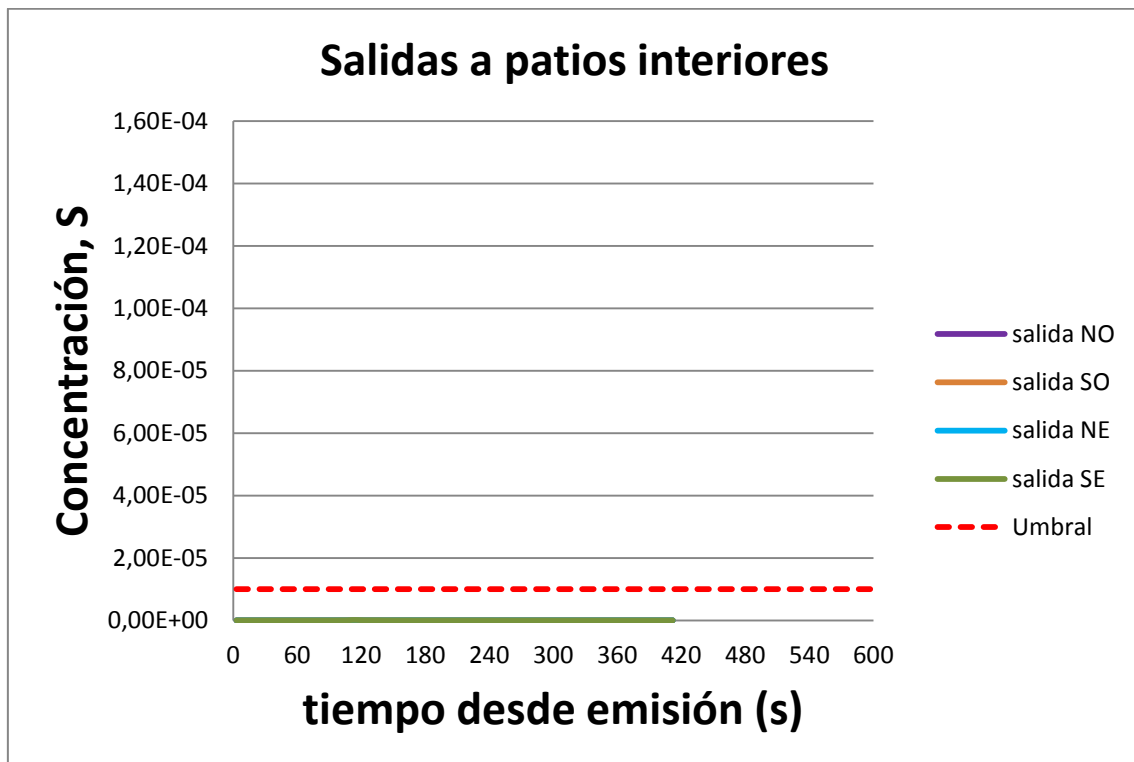


Figura V.74. Concentración en las salidas interiores. Viento del O-NO a 25 km/h

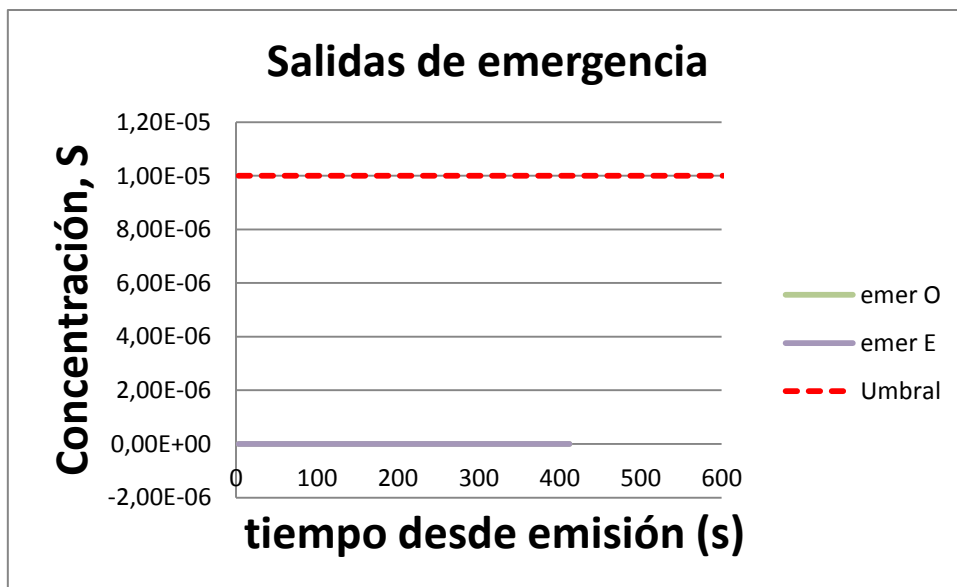


Figura V.75. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del O-NO a 25 km/h

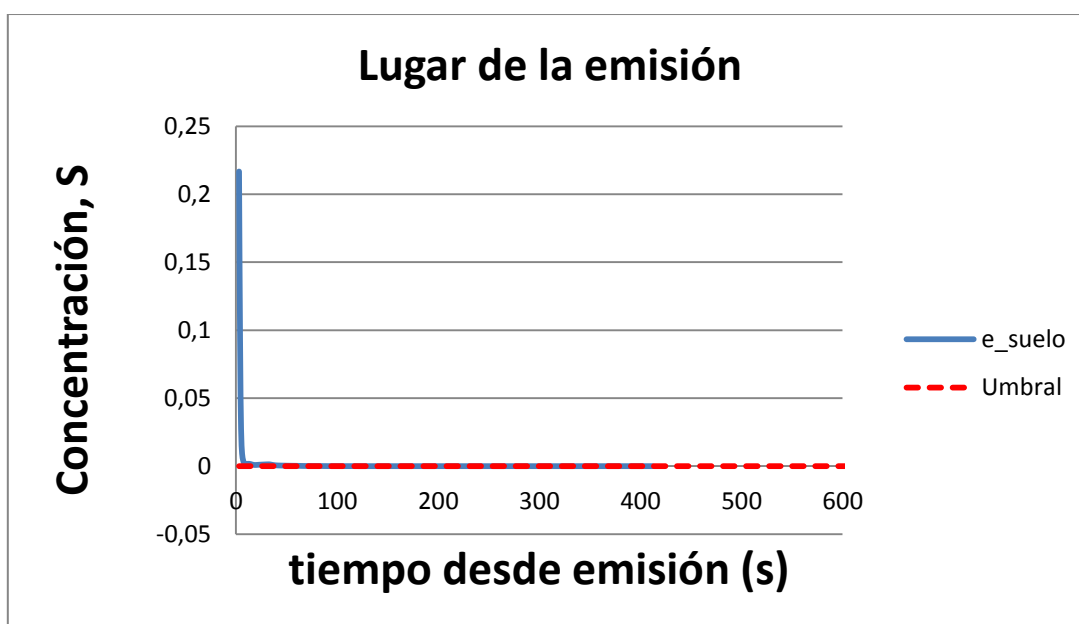


Figura V.76. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del O-NO a 25 km/h

### 2.3.3 Viento a 30 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

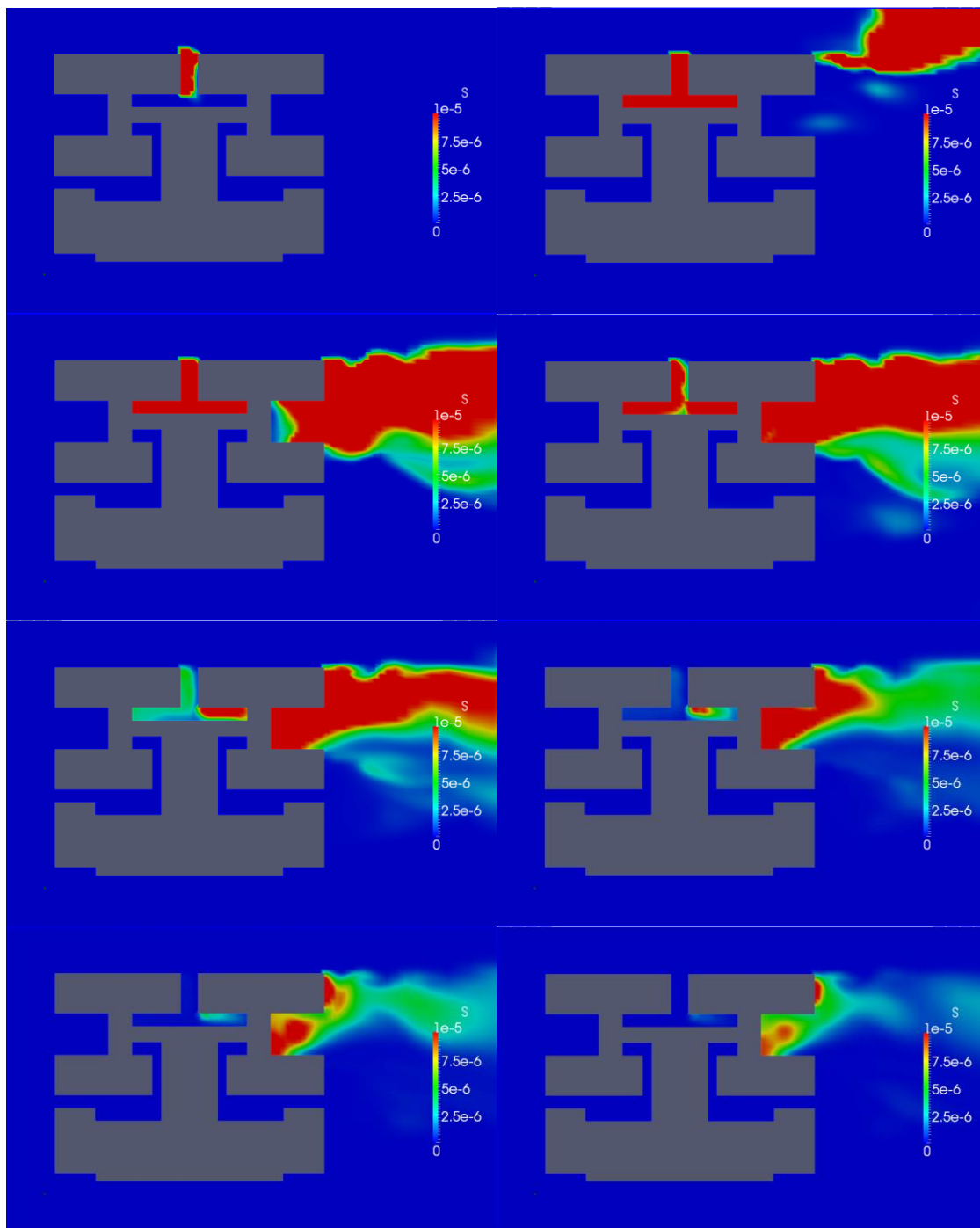


Figura V.78a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 30 km/h



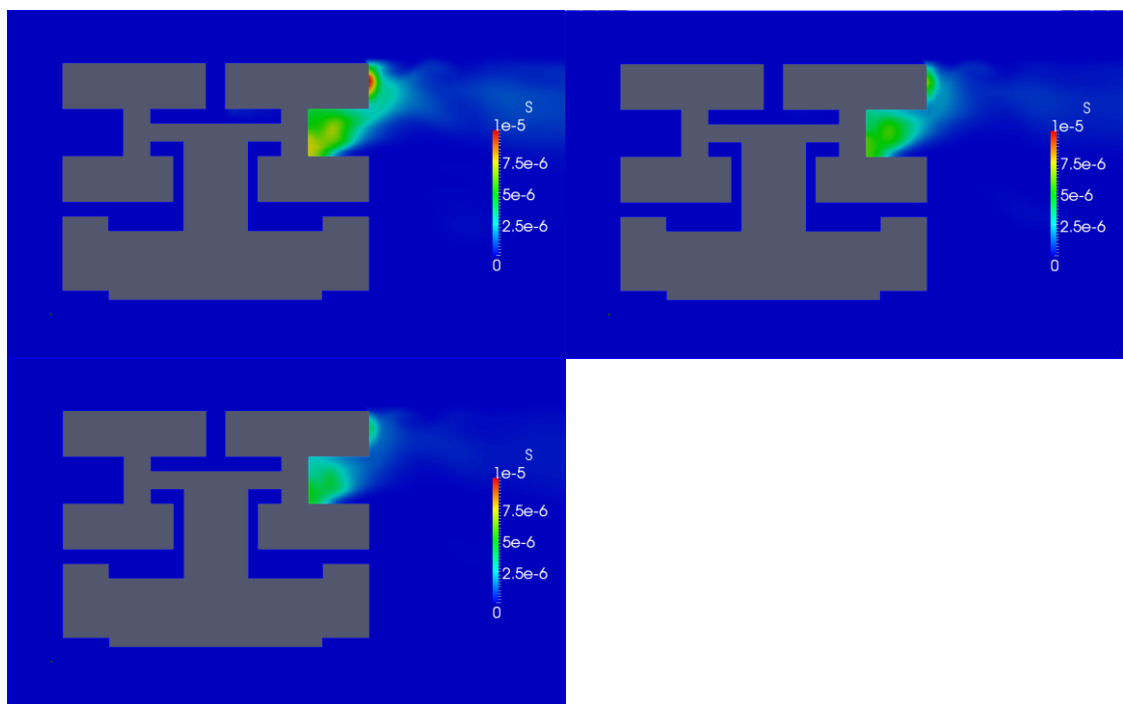


Figura V.78b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 30 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

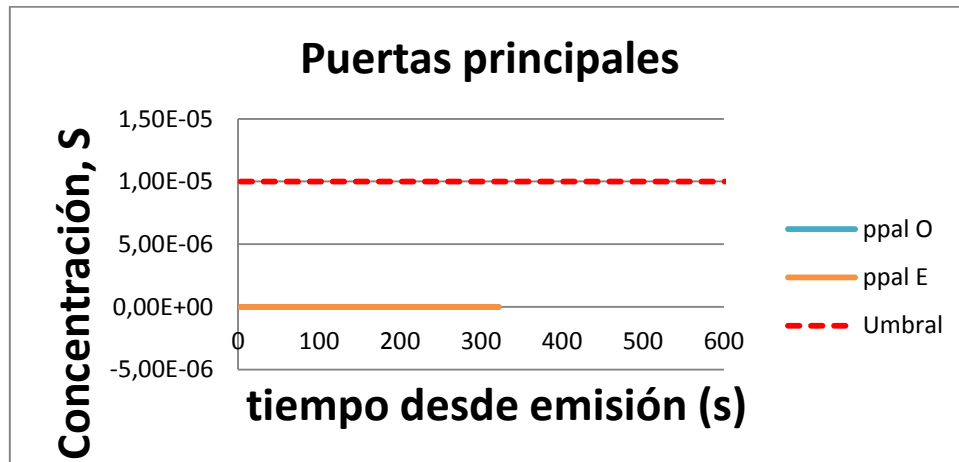


Figura V.79. Concentración en las puertas principales. Viento del O-NO a 30 km/h

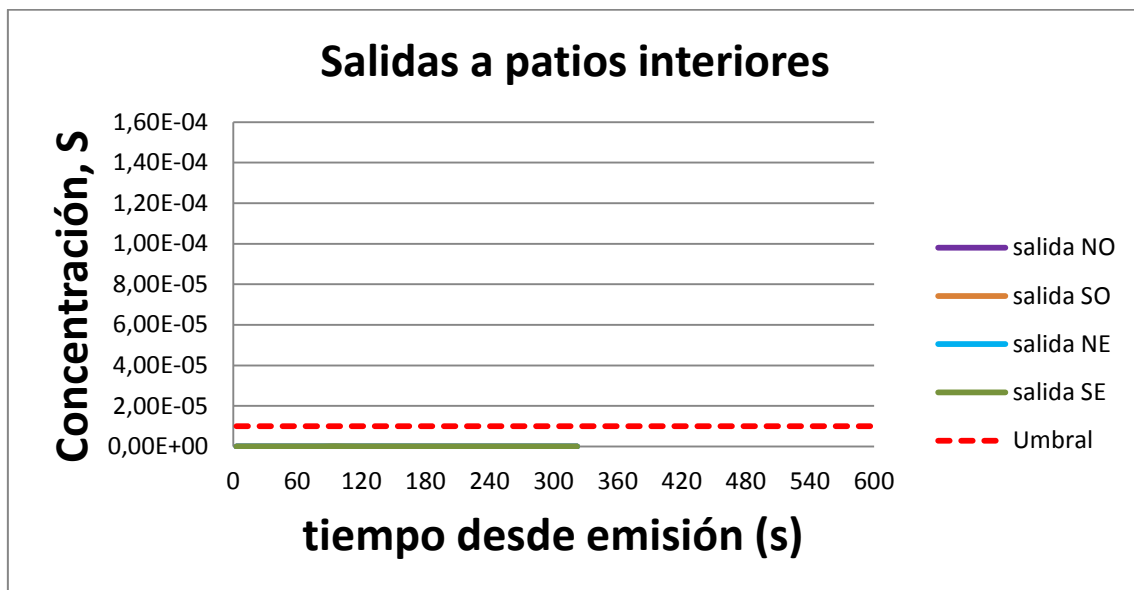


Figura V.80. Concentración en las salidas interiores. Viento del O-NO a 30 km/h

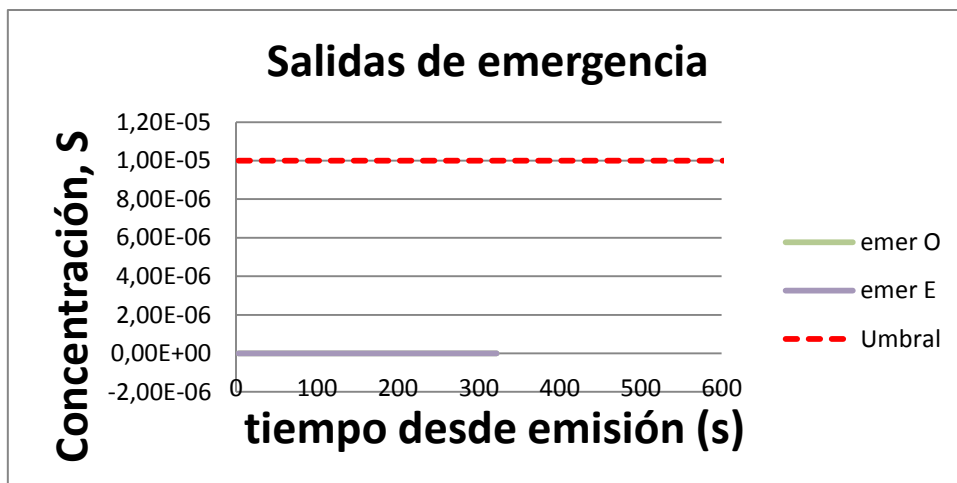


Figura V.81. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del O-NO a 30 km/h

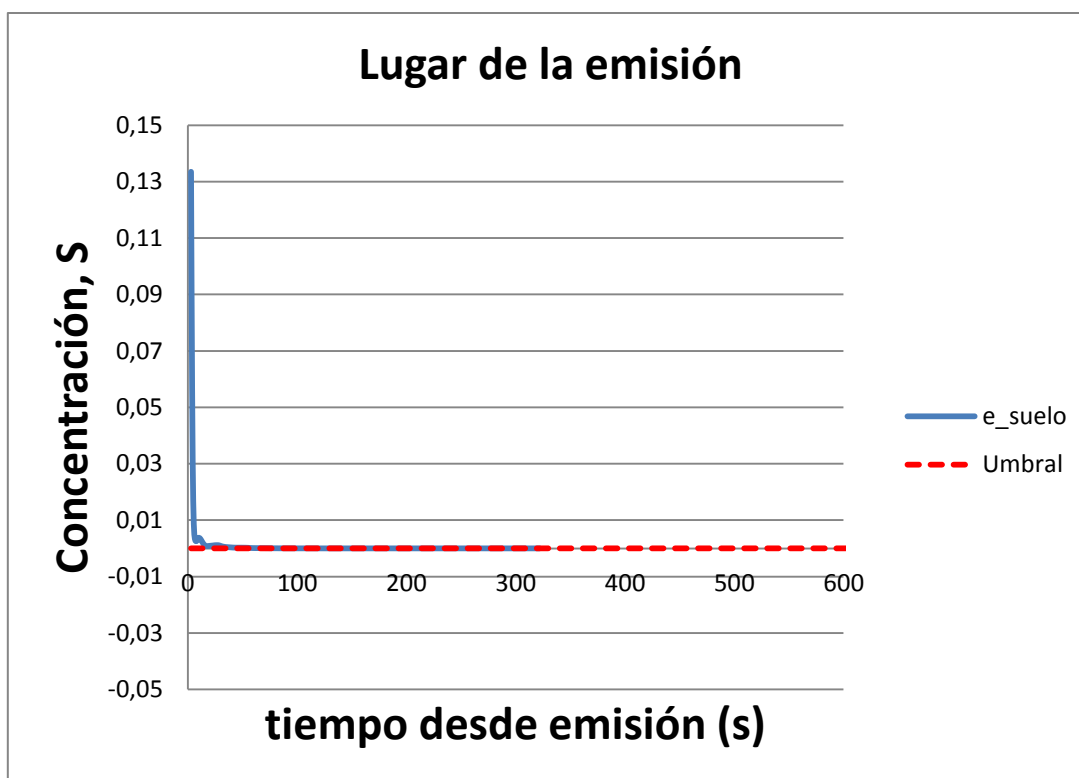


Figura V.82. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del O-NO a 30 km/h

### 2.3.4 Viento a 35 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

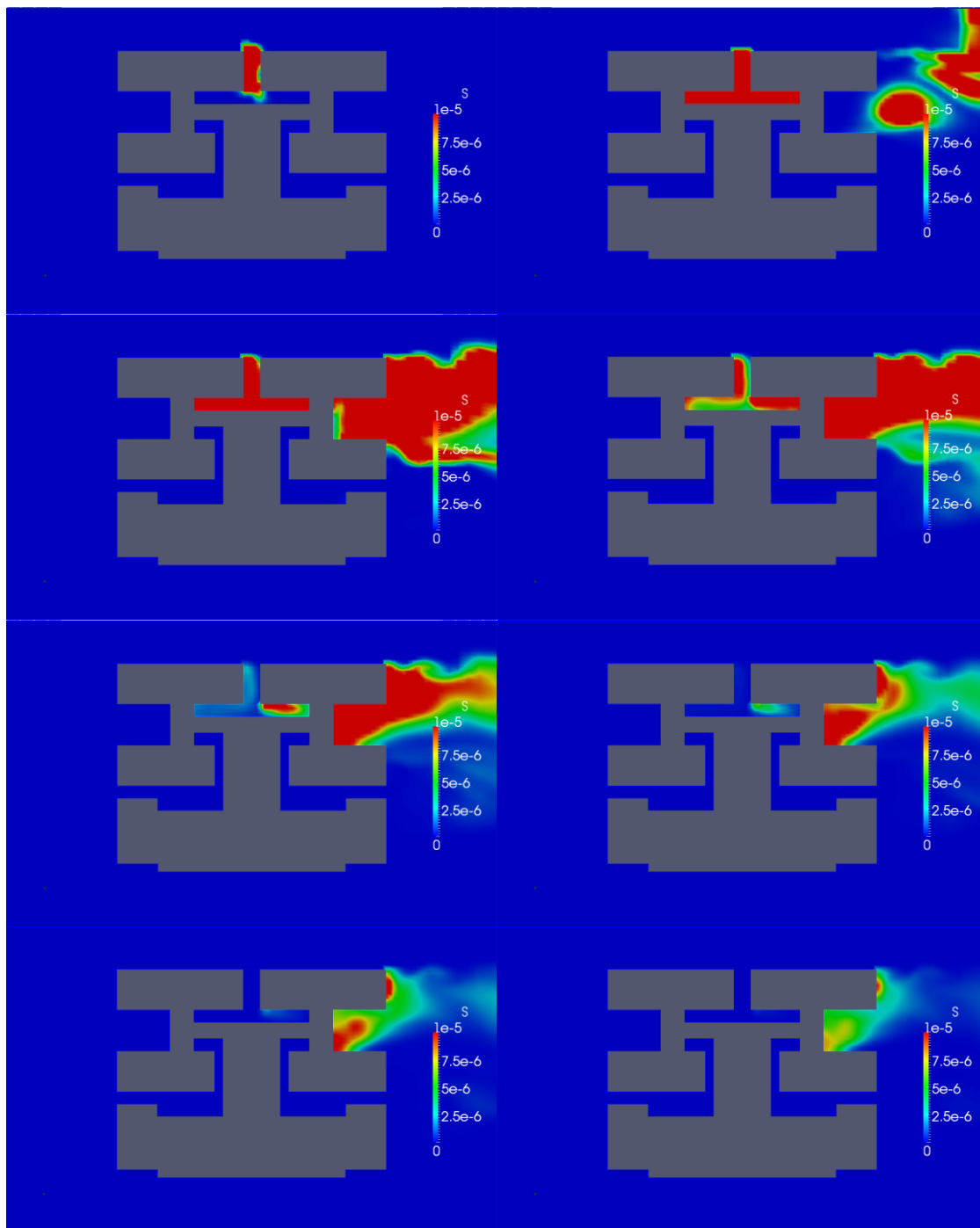


Figura V.84a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 35 km/h

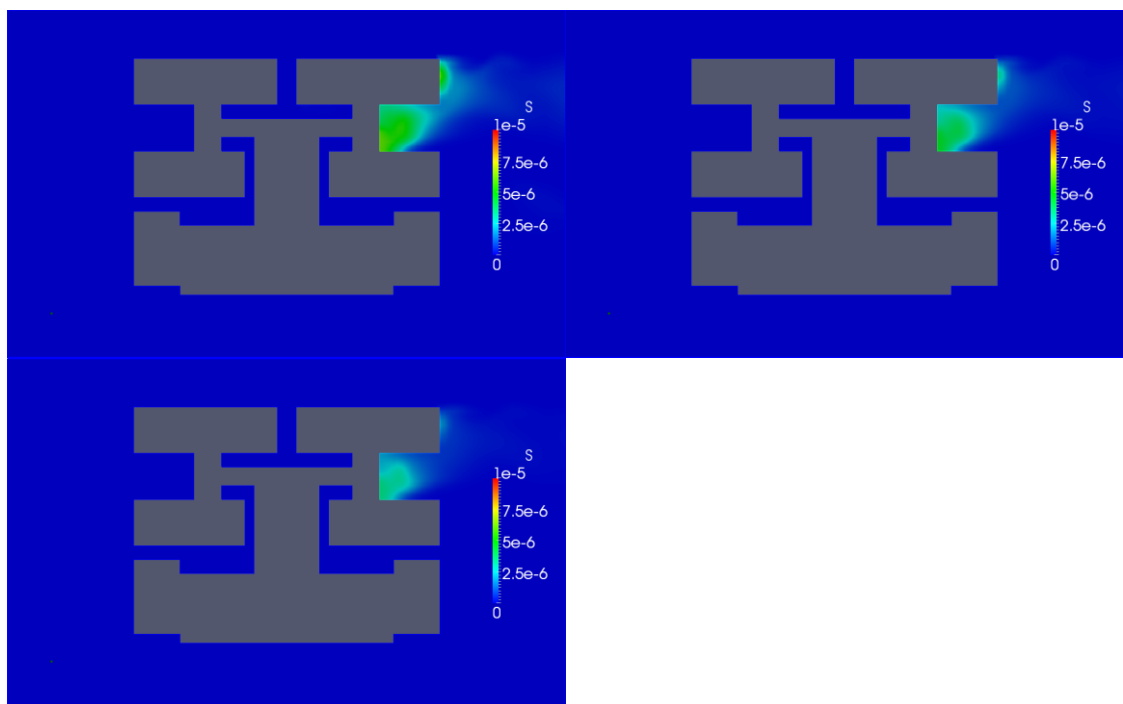


Figura V.84b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 35 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

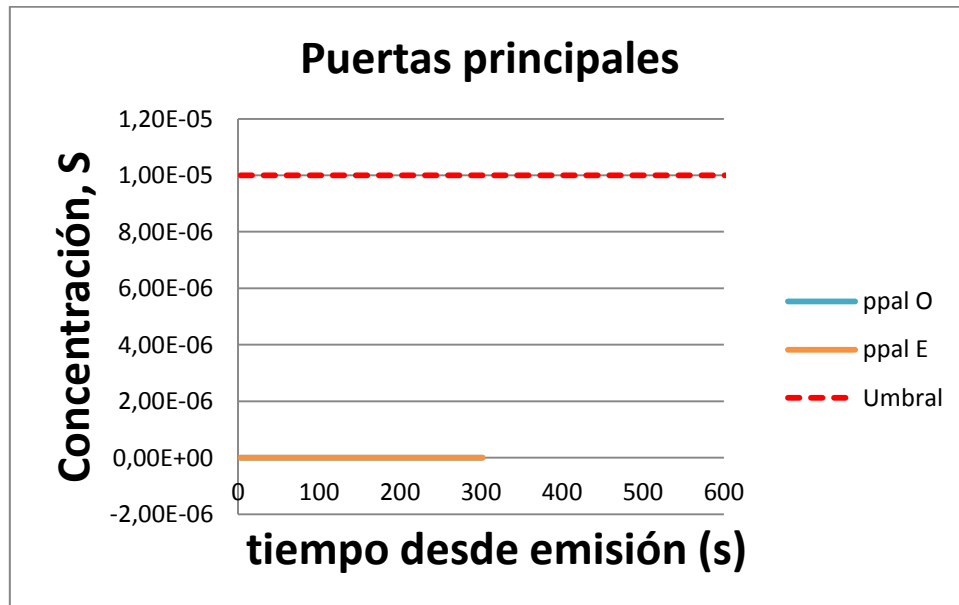


Figura V.85. Concentración en las puertas principales. Viento del O-NO a 35 km/h

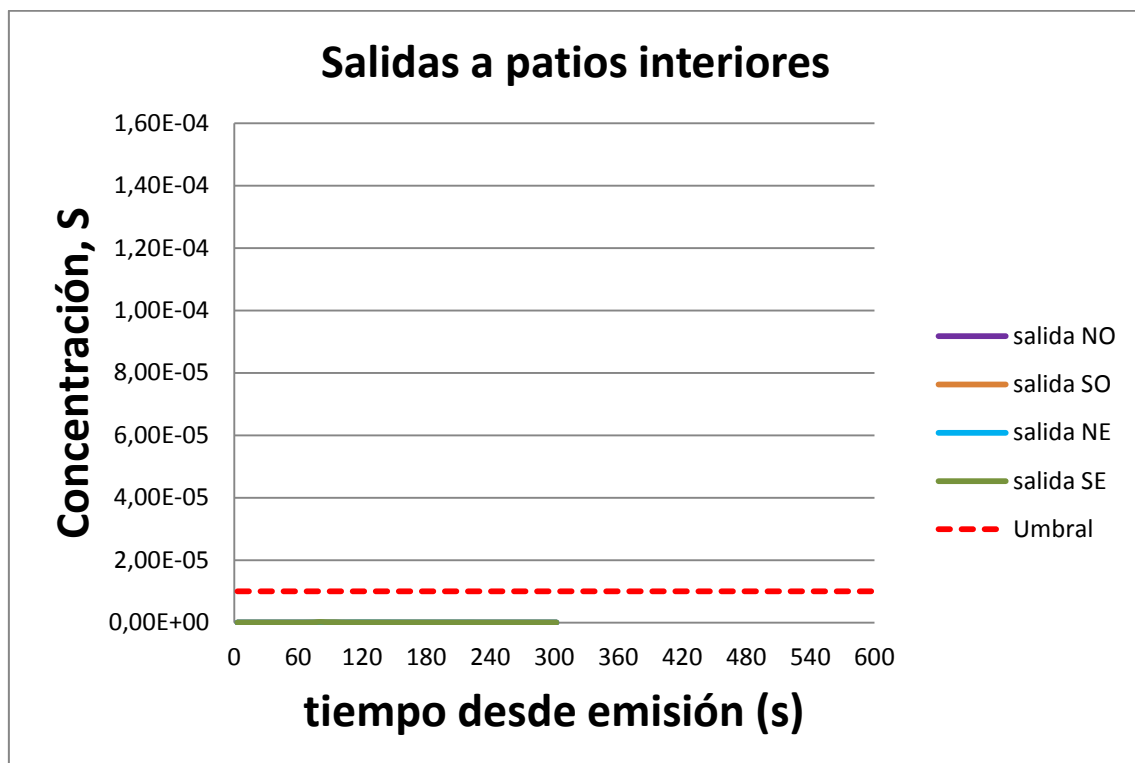


Figura V.86. Concentración en las salidas interiores. Viento del O-NO a 35 km/h

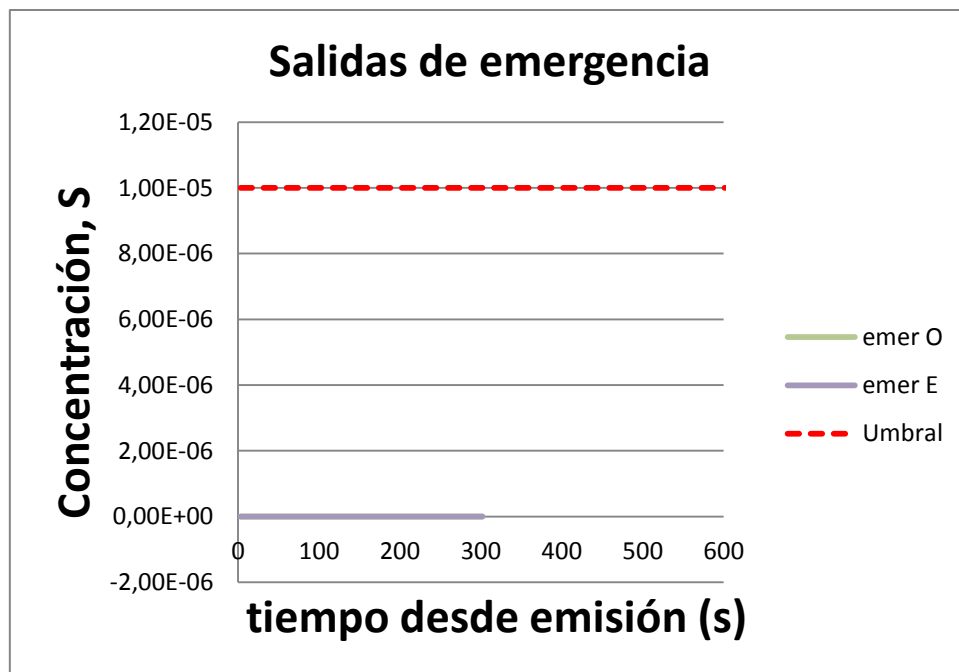


Figura V.87. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del O-NO a 35 km/h

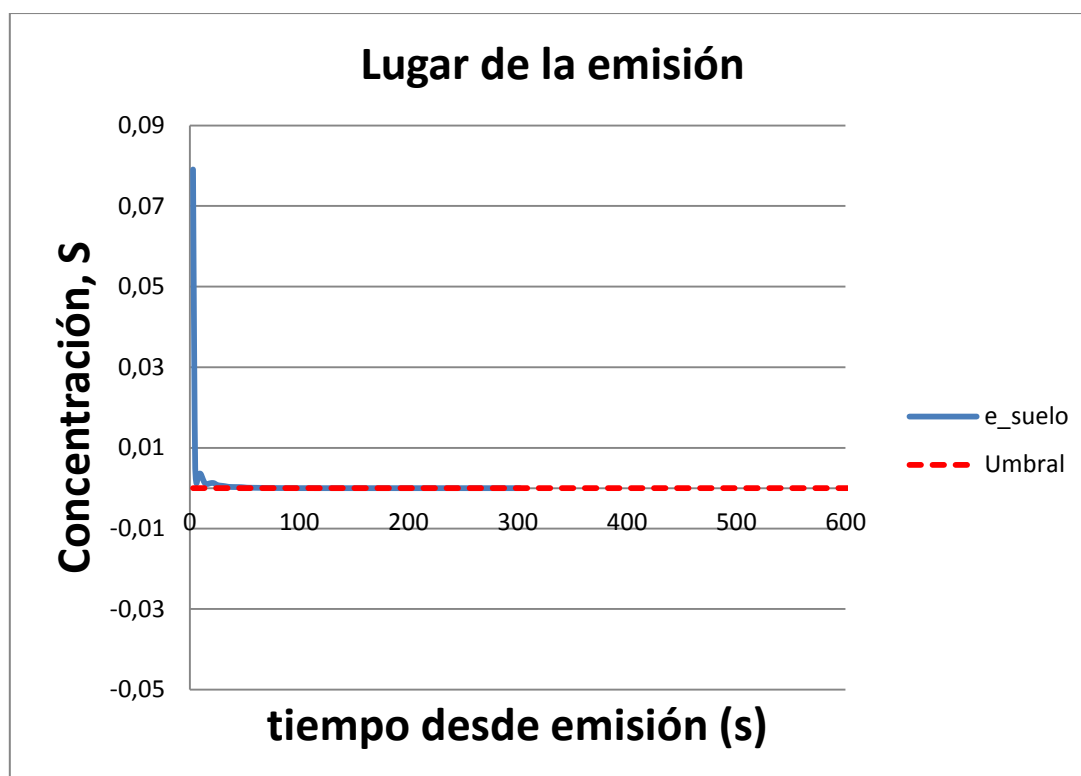


Figura V.88. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del O-NO a 35 km/h

### 2.3.5 Viento a 40 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

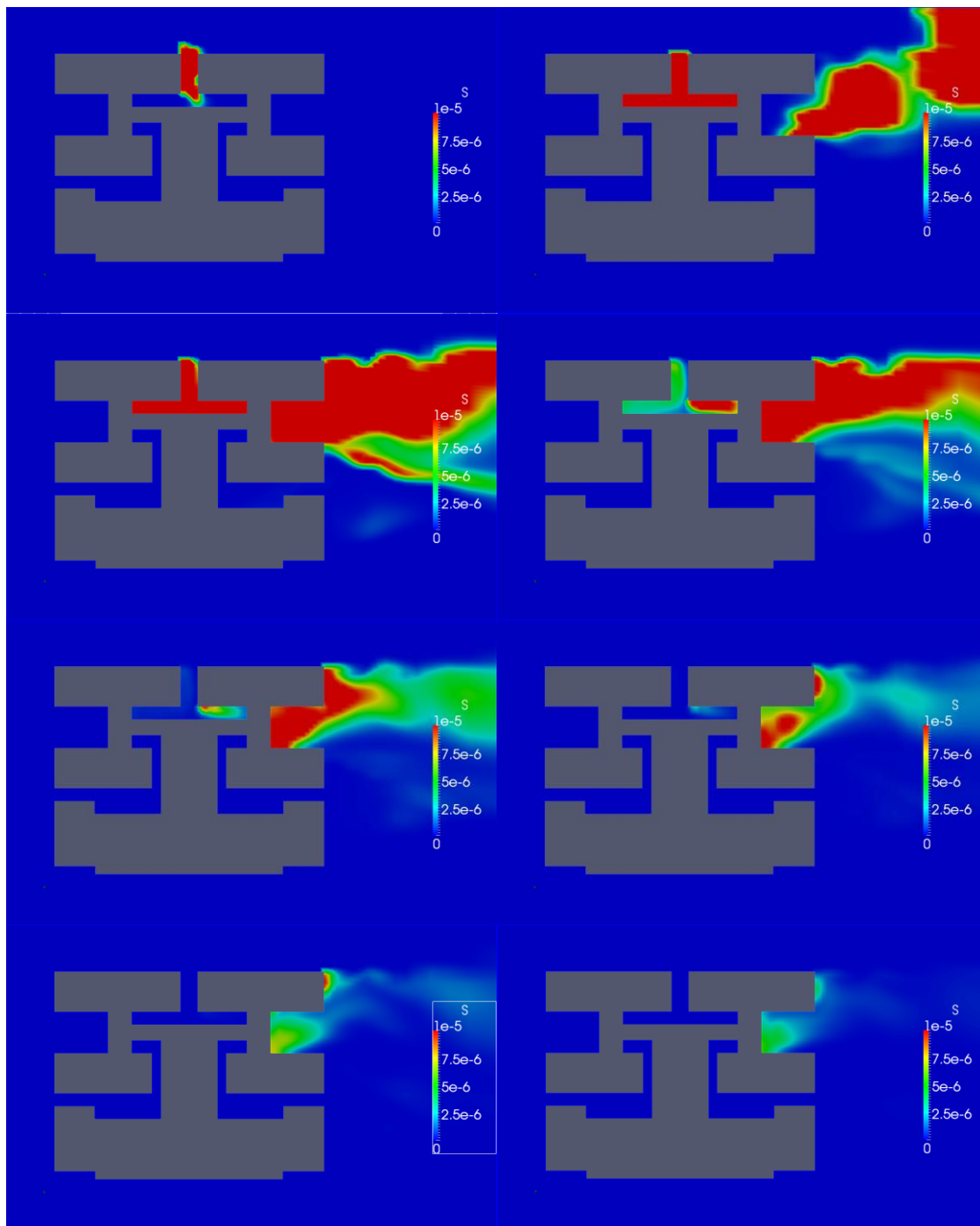


Figura V.90a. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 40 km/h



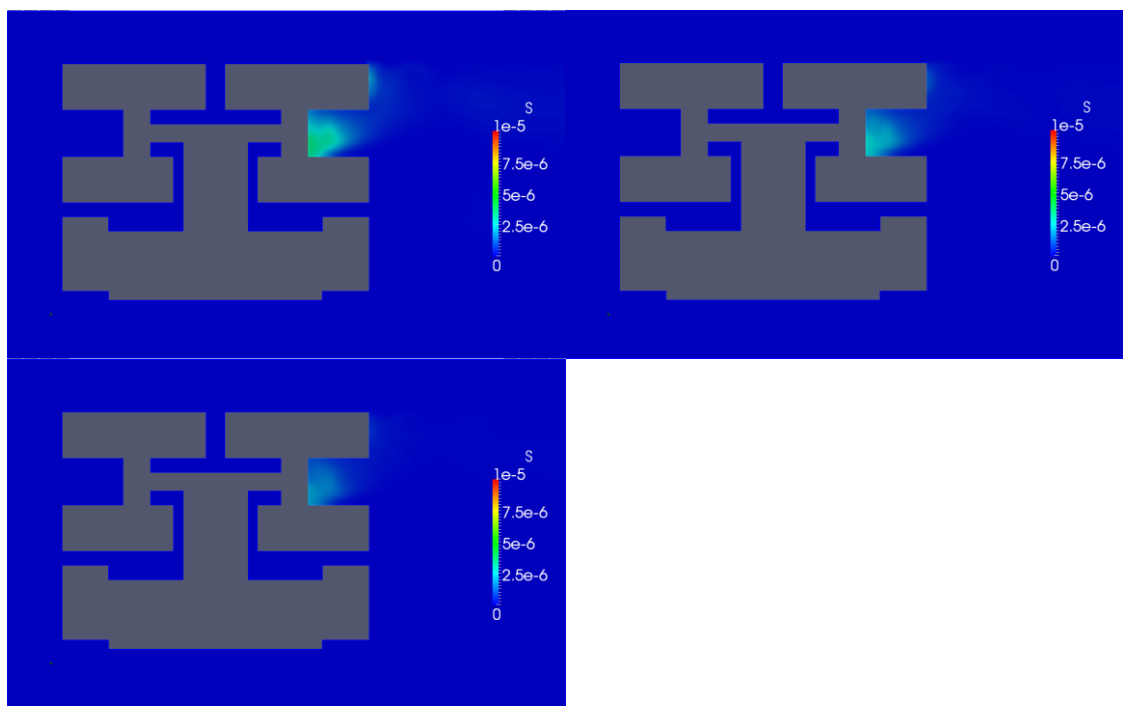


Figura V.90b. Secuencia del campo de concentraciones cada 30s. Viento del O-NO a 40 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

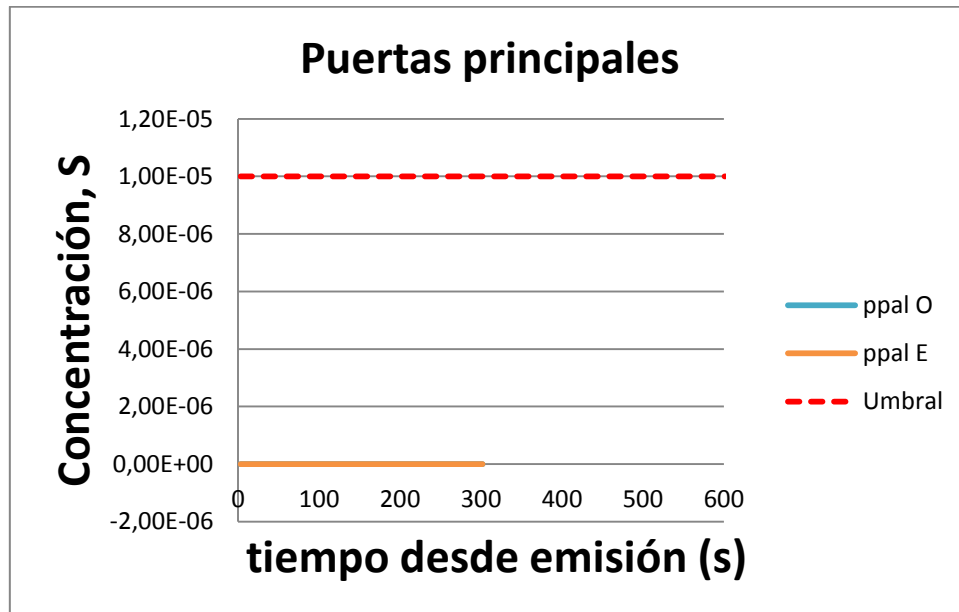


Figura V.91. Concentración en las puertas principales. Viento del O-NO a 40 km/h

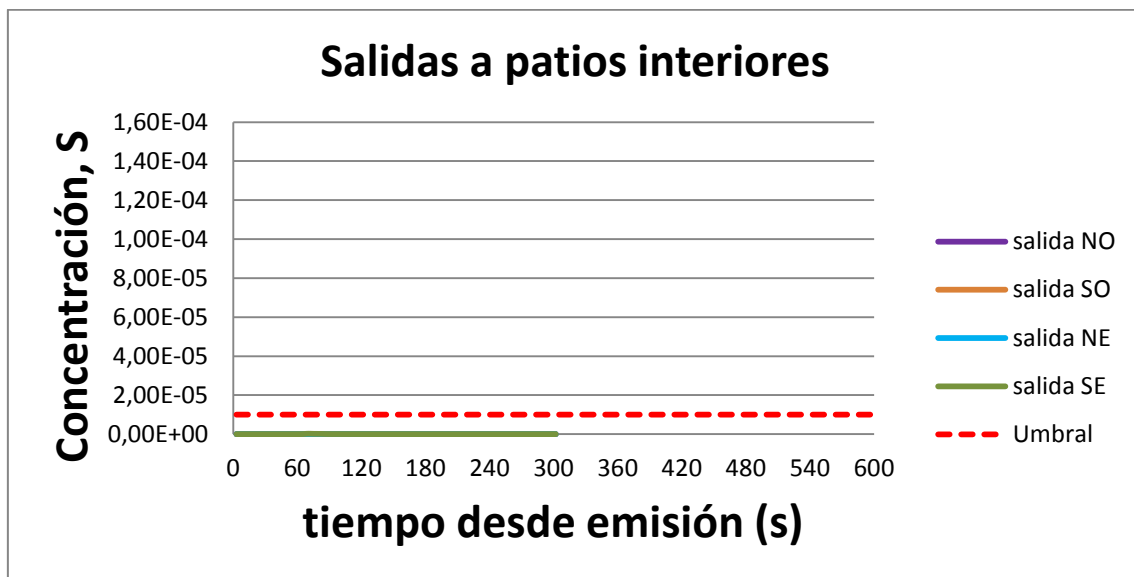


Figura V.92. Concentración en las salidas interiores. Viento del O-NO a 40 km/h

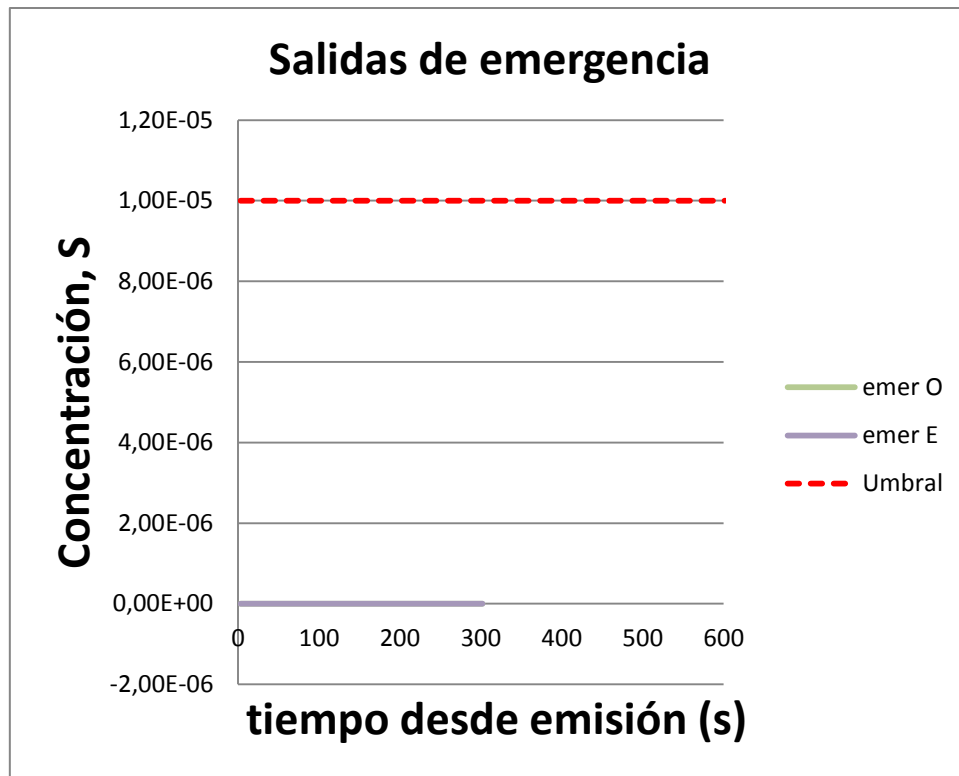


Figura V.93. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del O-NO a 40 km/h

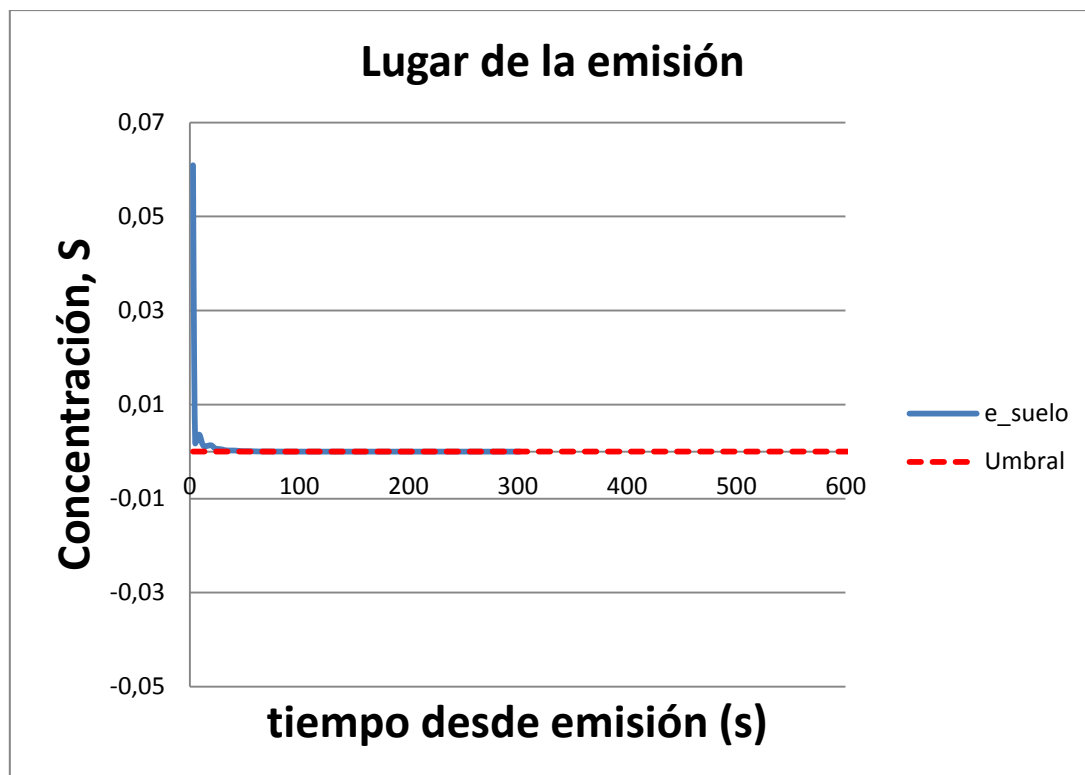


Figura V.94. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del O-NO a 40 km/h

## 2.4 Viento del SE

### 2.4.1 Viento a 5 km/h

#### 1) Evolución del campo de concentraciones

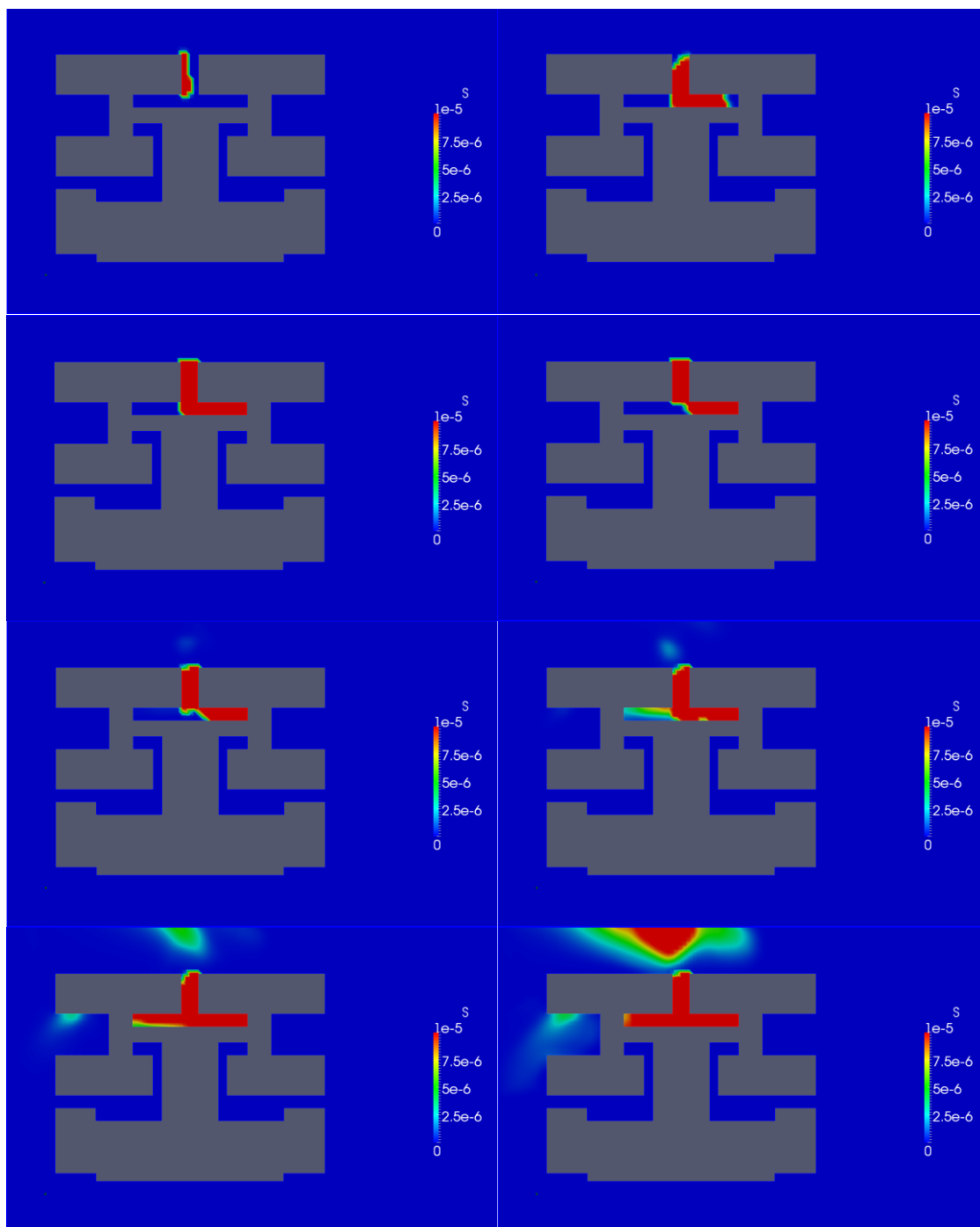


Figura V.96a. Secuencia del campo de concentraciones cada 60s. Viento del SE a 5 km/h

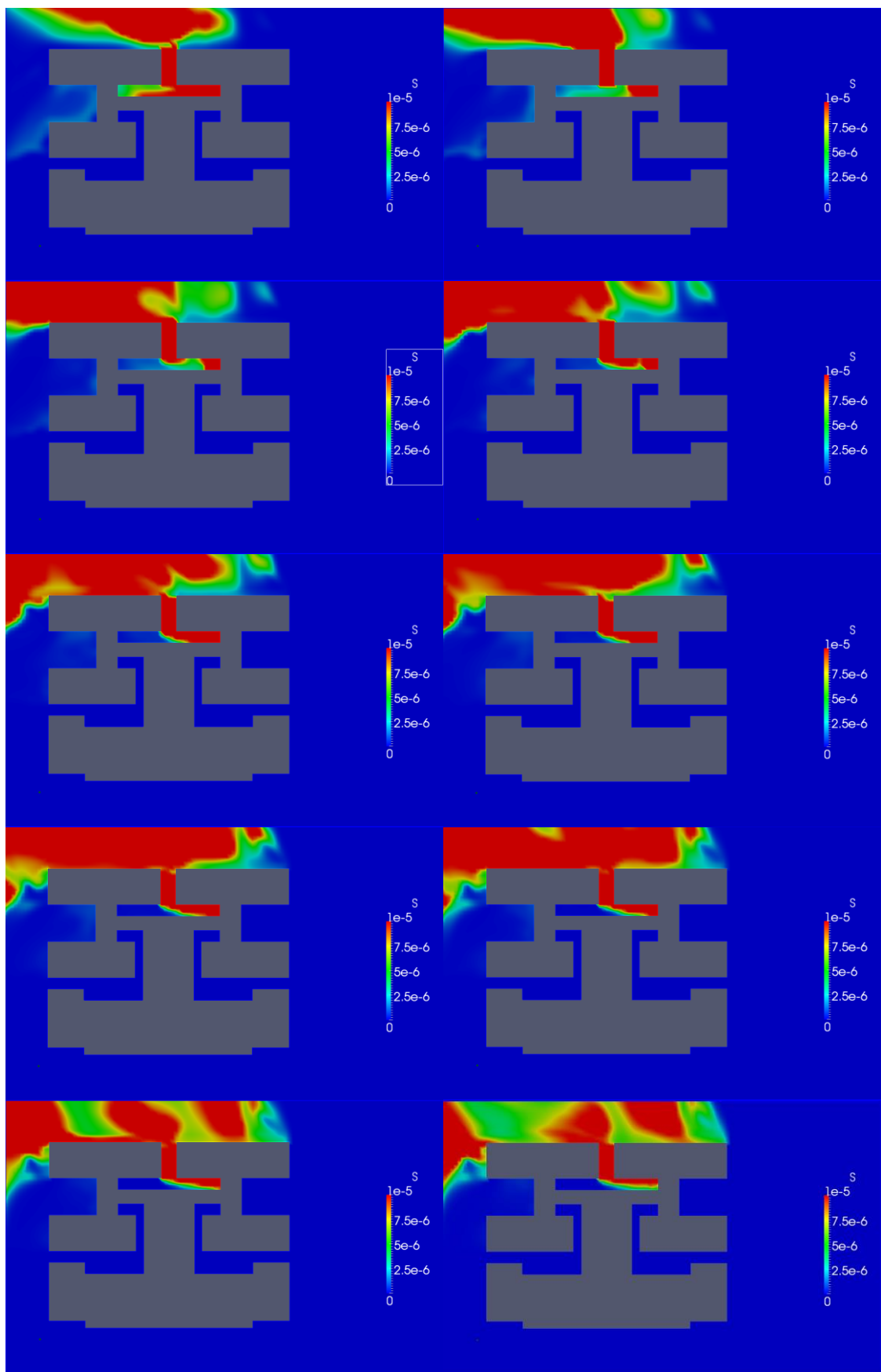


Figura V.96b. Secuencia del campo de concentraciones cada 60s. Viento del SE a 5 km/h

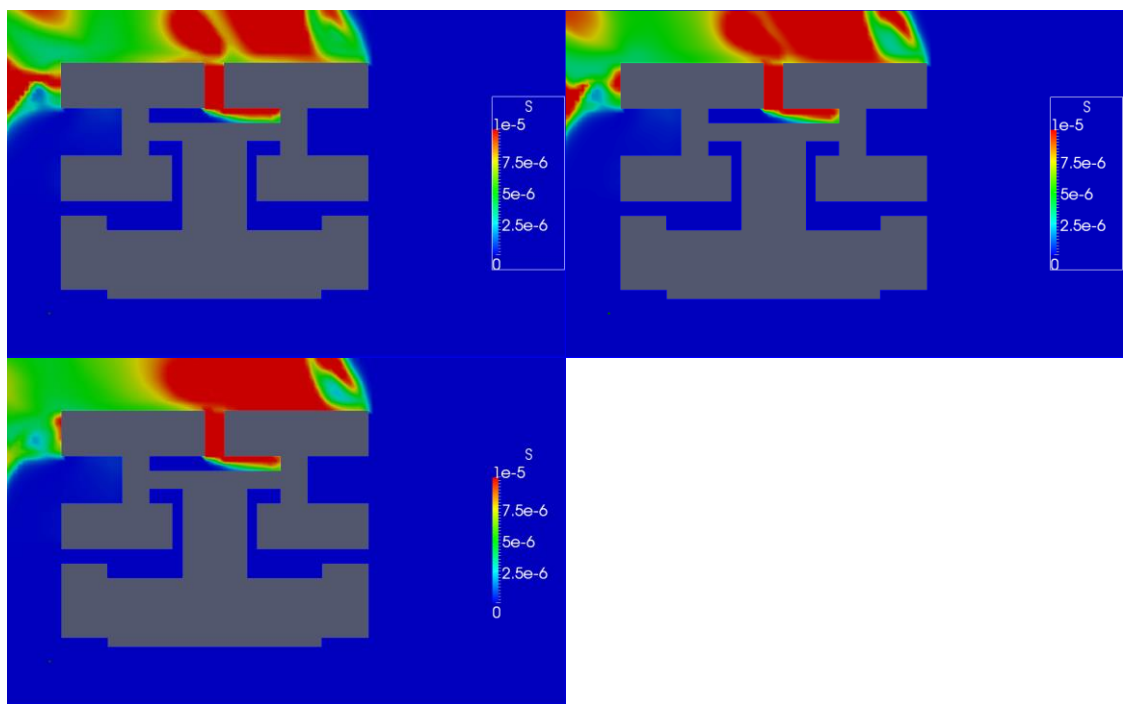


Figura V.96a. Secuencia del campo de concentraciones cada 60s. Viento del SE a 5 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

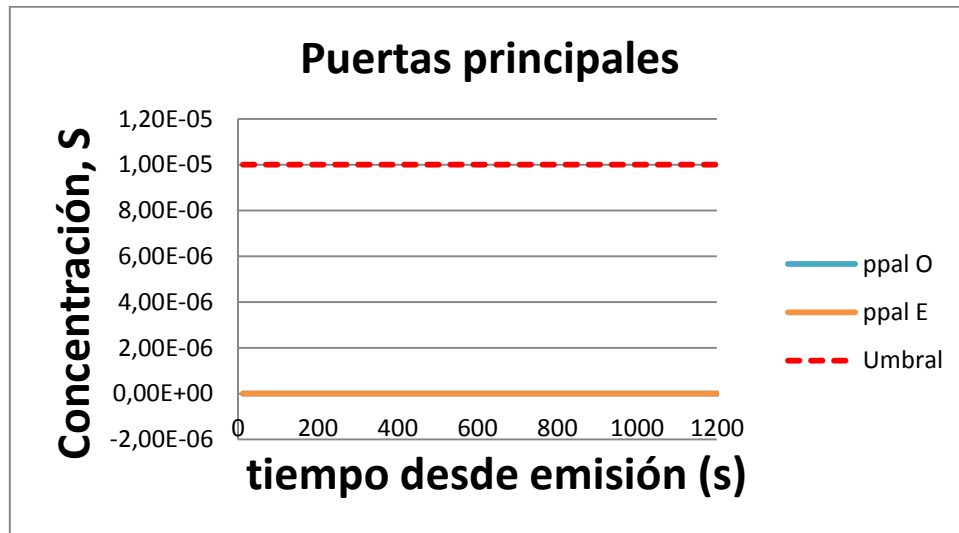


Figura V.97. Concentración en las puertas principales. Viento del SE a 5 km/h

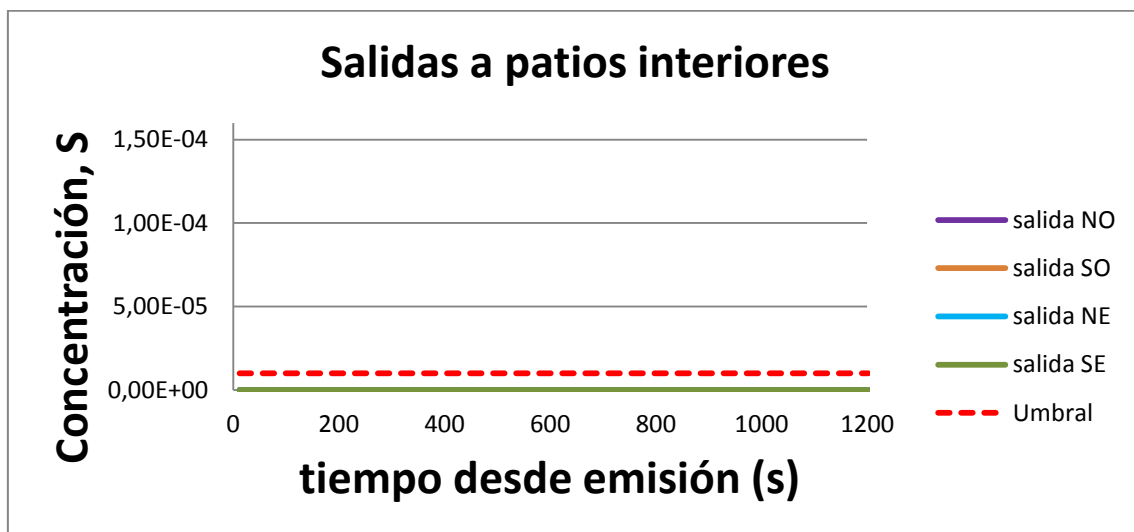


Figura V.98. Concentración en las salidas interiores. Viento del SE a 5 km/h

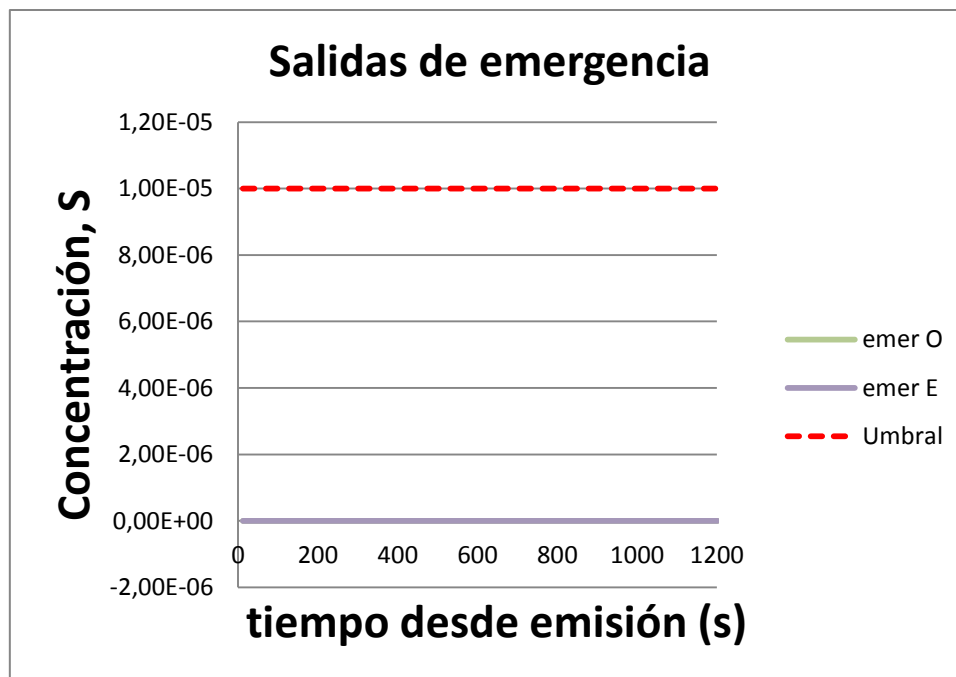


Figura V.99. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del SE a 5 km/h

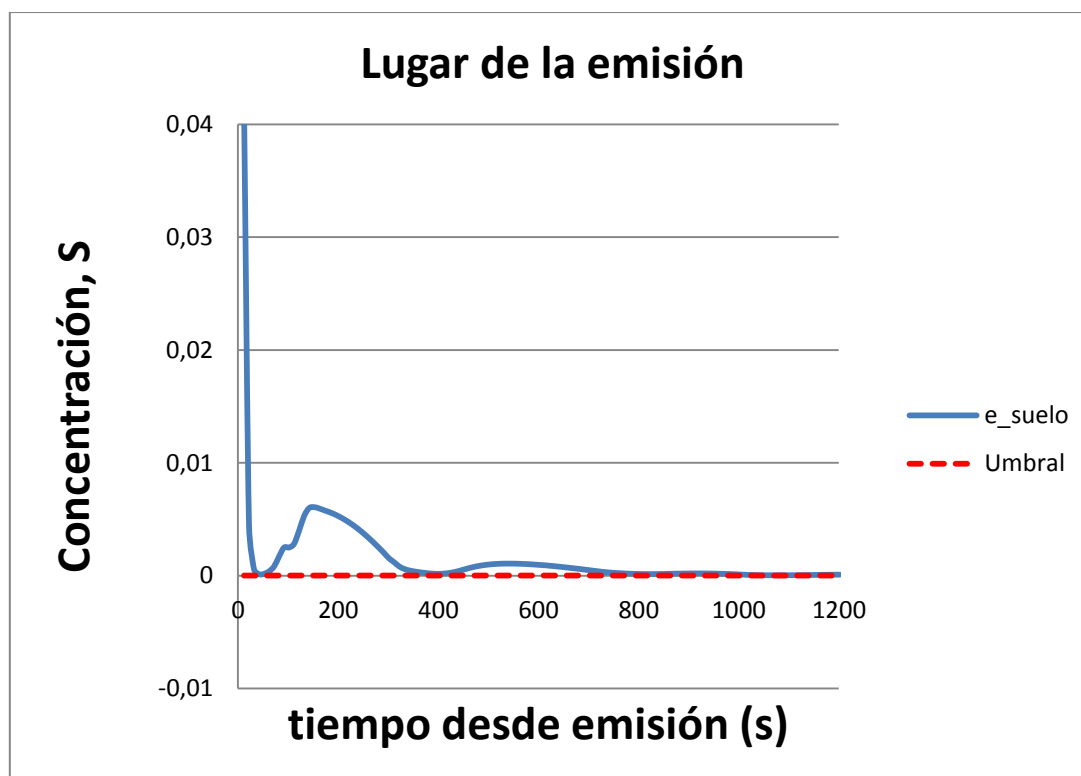


Figura V.100. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del SE a 5 km/h



## 2.4.2 Viento a 10 km/h

### 1) Evolución del campo de concentraciones

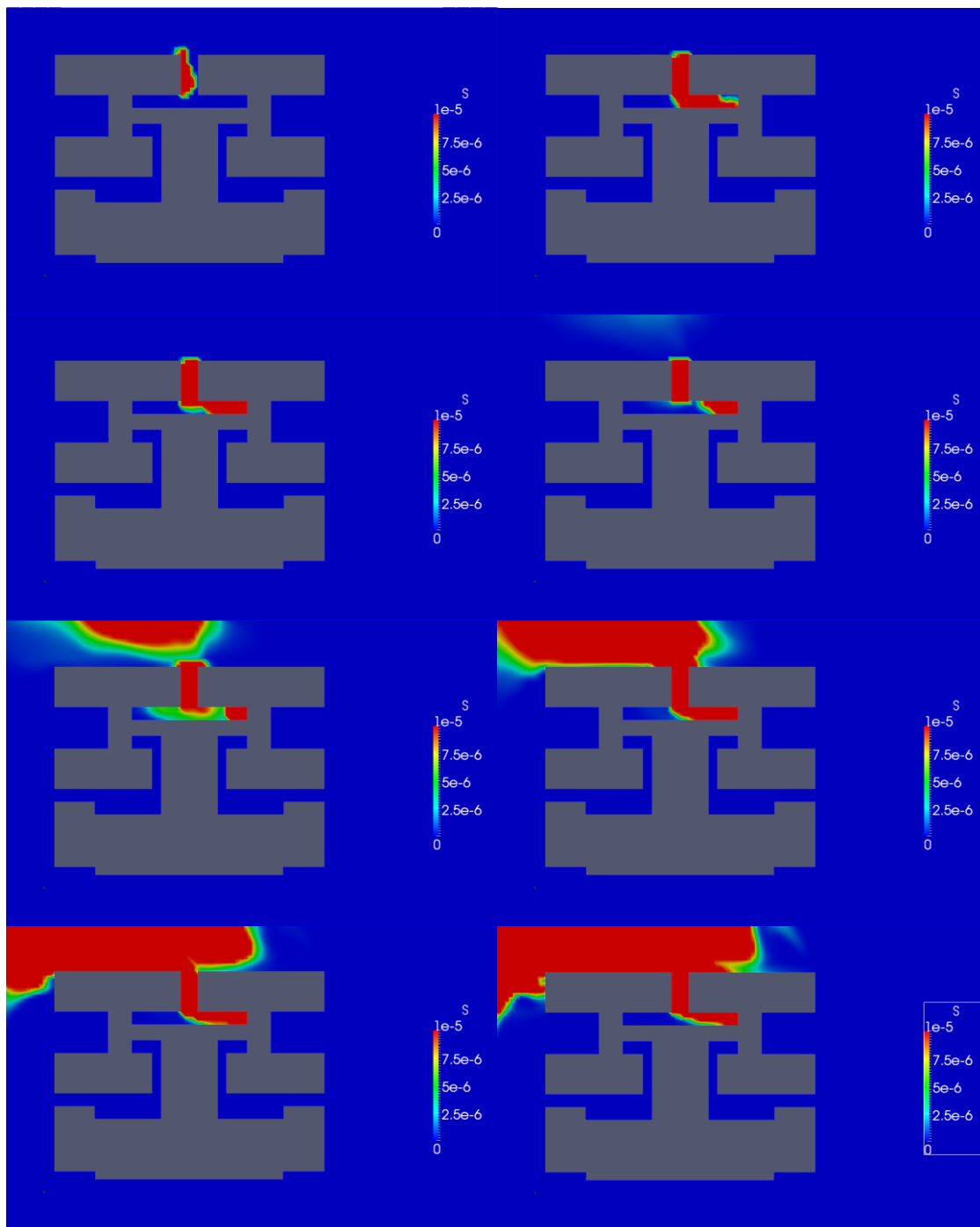


Figura V.102a. Secuencia del campo de concentraciones cada 60s. Viento del SE a 10 km/h

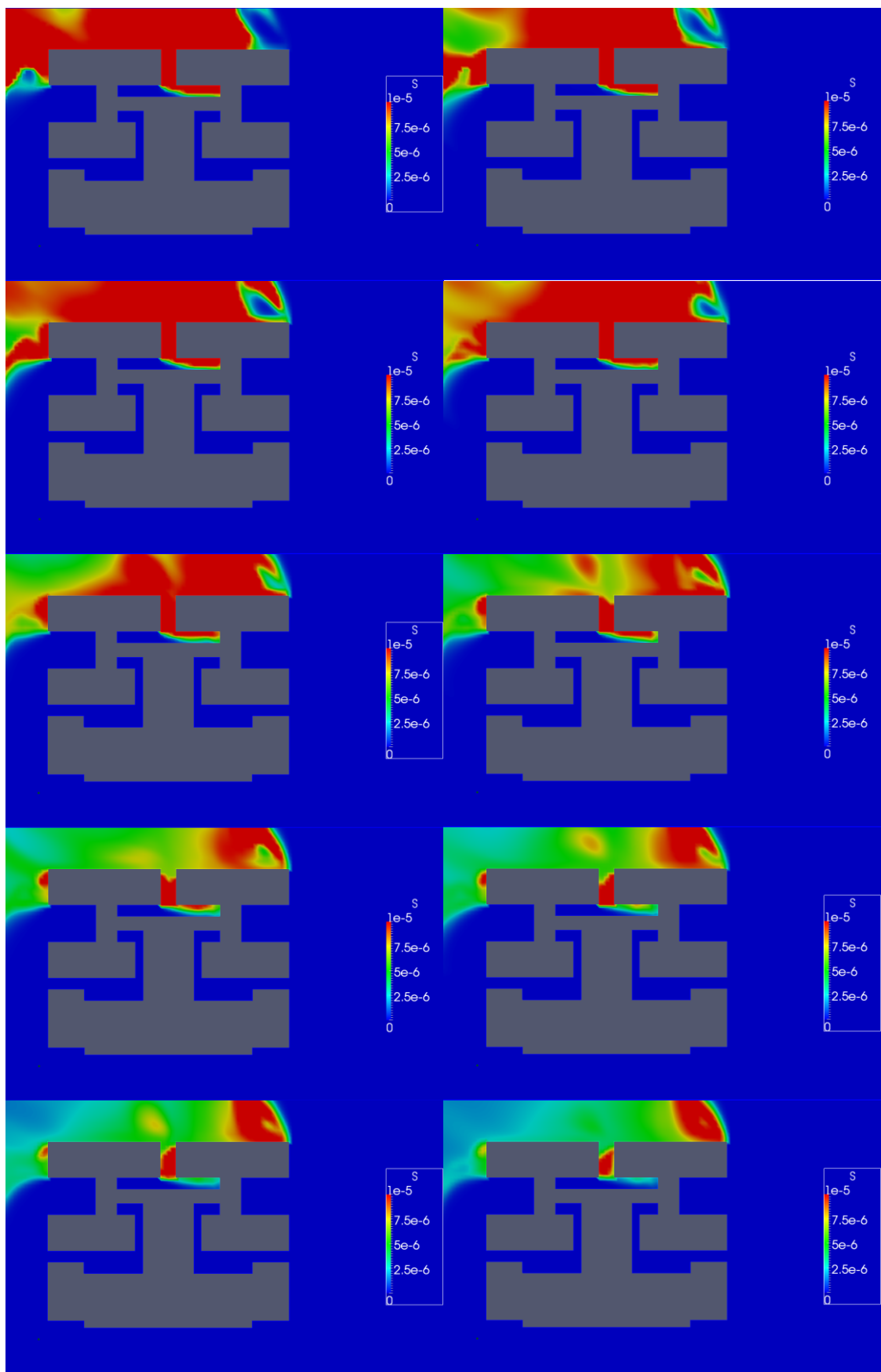


Figura V.102b. Secuencia del campo de concentraciones cada 60s. Viento del SE a 10 km/h

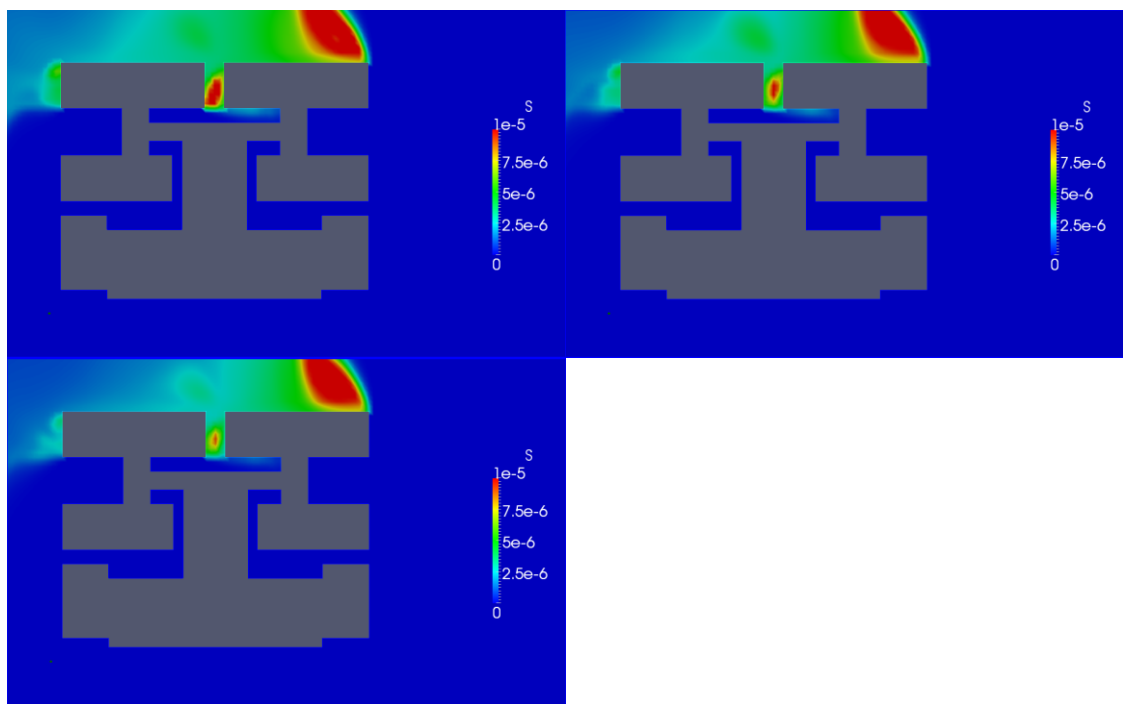


Figura V.102c. Secuencia del campo de concentraciones cada 60s. Viento del SE a 10 km/h

## 2) Seguimiento de la peligrosidad en puntos clave del entorno

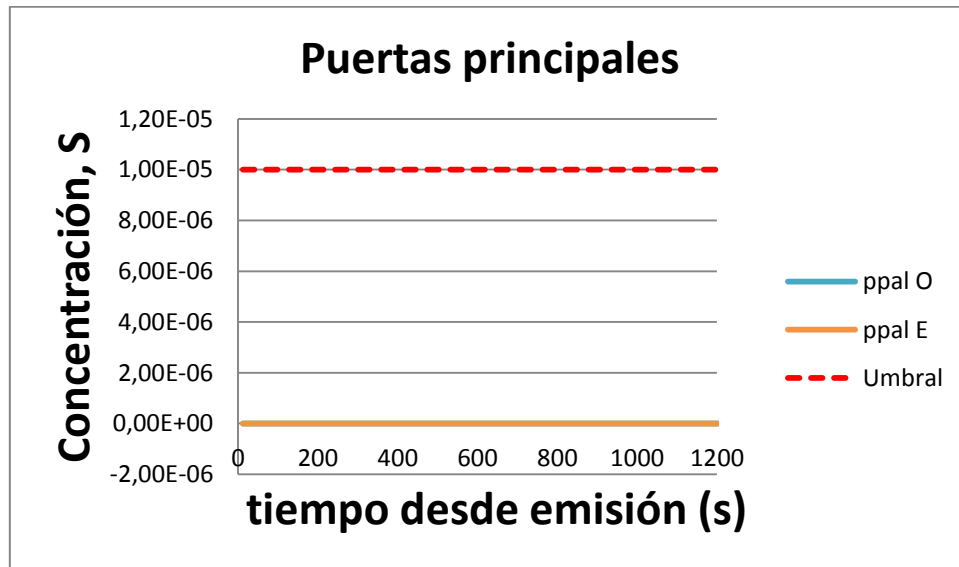


Figura V.103. Concentración en las puertas principales. Viento del SE a 10 km/h

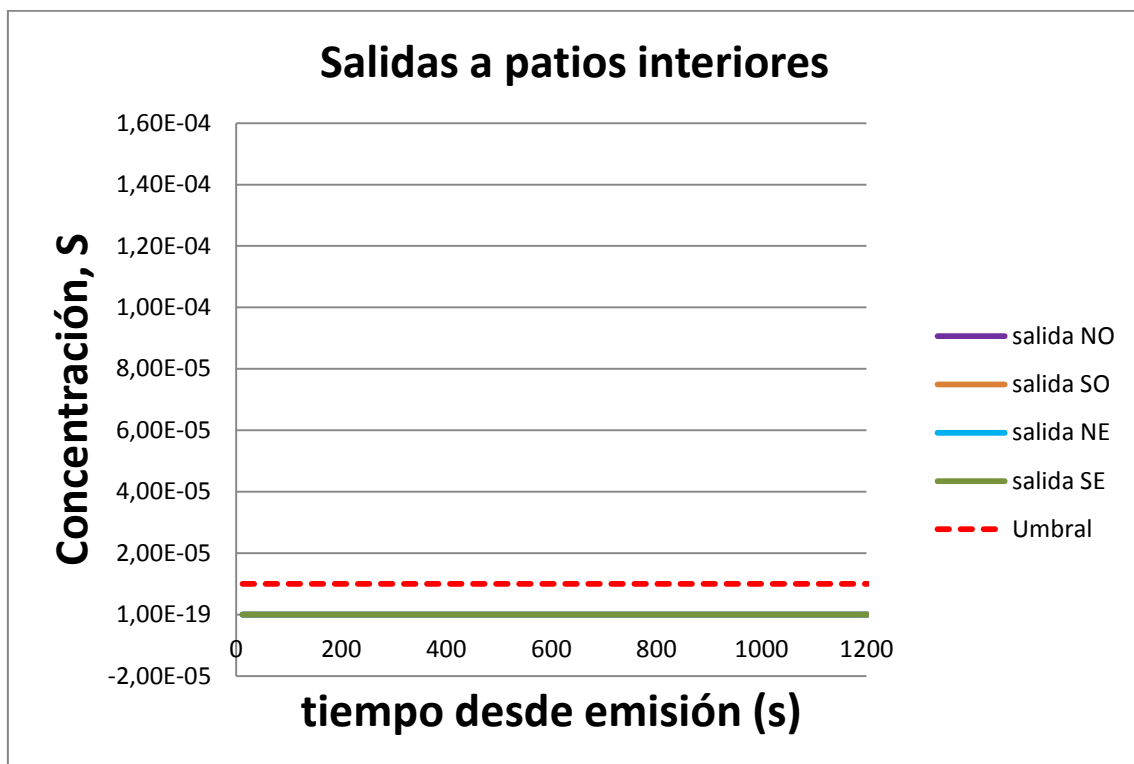


Figura V.104. Concentración en las salidas interiores. Viento del SE a 10 km/h

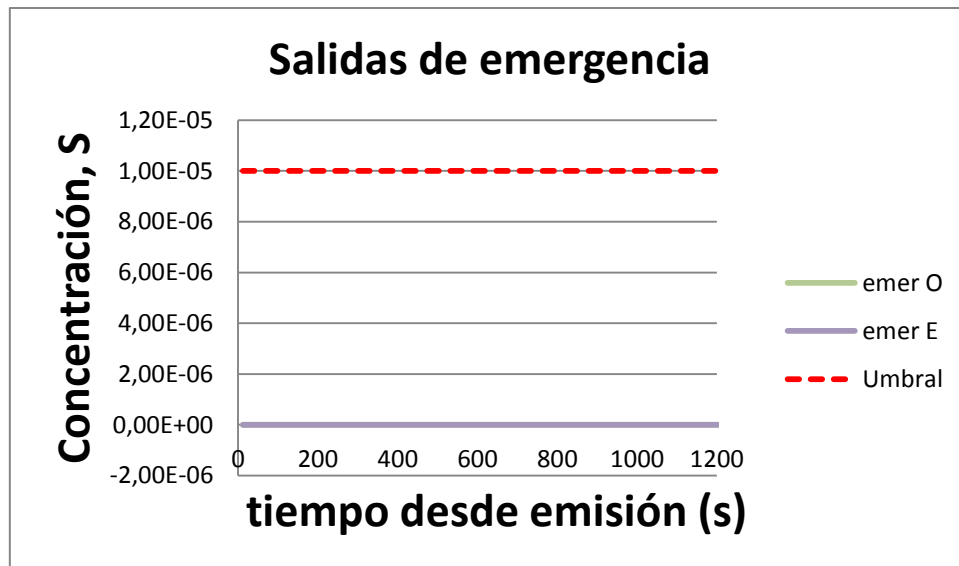


Figura V.105. Concentración en las salidas de emergencia. Viento del SE a 10 km/h

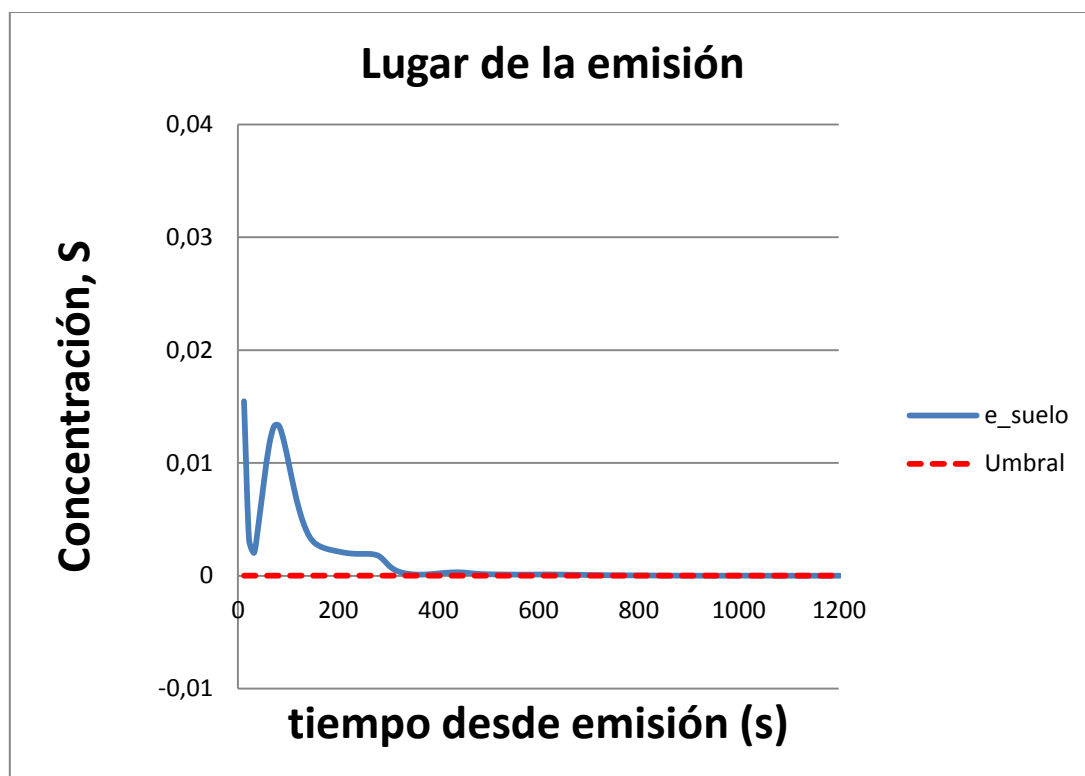


Figura V.106. Concentración en el lugar de la emisión. Viento del SE a 10 km/h

