

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ

Colegio de Ciencias e Ingenierías

**Simulación del atrapamiento de un contaminante genérico
en un sistema de filtrado de lecho esférico mediante
Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)**

Proyecto de Investigación y Desarrollo

Oscar Luis Castillo Santacruz

Ingeniería Química

Trabajo de titulación presentado como requisito
para la obtención del título de
Ingeniero Químico

Quito, 21 de diciembre de 2017

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ

Colegio de Ciencias e Ingenierías

TRABAJO DE TITULACIÓN

Simulación del atrapamiento de un contaminante genérico en un sistema de filtrado de lecho esférico mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)

Oscar Luis Castillo Santacruz

Calificación:

Nombre del profesor, Título académico

Andrea Landázuri, Ph.D.

Firma de los profesores

Quito, 21 de diciembre de 2017

Derechos de Autor

Por medio del presente documento certifico que he leído todas las Políticas y Manuales de la Universidad San Francisco de Quito USFQ, incluyendo la Política de Propiedad Intelectual USFQ, y estoy de acuerdo con su contenido, por lo que los derechos de propiedad intelectual del presente trabajo quedan sujetos a lo dispuesto en esas Políticas.

Asimismo, autorizo a la USFQ para que realice la digitalización y publicación de este trabajo en el repositorio virtual, de conformidad a lo dispuesto en el Art. 144 de la Ley Orgánica de Educación Superior.

Firma del estudiante: _____

Nombres y apellidos: Oscar Luis Castillo Santacruz

Código: 111079

Cédula de Identidad: 1722078027

Lugar y fecha: Quito, 21 diciembre de 2017

Resumen

En el presente proyecto se desarrolló el modelado de un filtro empaquetado con esferas de borosilicato para el tratamiento de aguas residuales mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). Se desarrolló la geometría modelo del sistema con ayuda del software INVENTOR de AutoCAD, esta herramienta permitió construir el filtro al igual que el empaquetamiento de esferas en su interior. El filtro consistió en: un codo de 90° de 1/2", un retenedor de sólidos de 11 [mm] de largo, una columna de 152.4[mm] de largo y diámetro interno 11[mm], esferas de 3.5 [mm] de diámetro, y un reductor de 1/2" a 1/4". Una vez obtenida la geometría, se la importó al software COMSOL Multiphysics® para llevar a cabo dos estudios dinámicos dentro del sistema. El primer estudio realizado consistió en describir el comportamiento del fluido dentro de la columna, considerando un modelo de flujo turbulento. Para ello se utilizó el módulo de *Fluid Flow*, con la interface de flujo turbulento *Turbulent Flow k- ω* . El segundo estudio permitió cuantificar la eficiencia de filtrado en base a la retención de partículas de un contaminante genérico de distintos tamaños en el filtro. Para este caso se empleó el modelo *Particle Tracing for fluid Flow*, con lo cual se cuantificó el porcentaje de partículas retenidas en un intervalo de tiempo. Finalmente realizados los estudios se obtuvieron los perfiles de presión, velocidad y la efectividad de filtrado del sistema.

Palabras Clave: Filtro, Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), *Turbulent Flow k- ω* , *Particle Tracing for Fluid Flow*, perfiles de velocidad y presión, efectividad de filtrado.

Abstract

A borosilicate filtration system packed with glass beads was modeled and simulated using Computational Fluid Dynamics (CFD) for water treatment applications. The geometrical model representation of the system was constructed in INVENTOR of AutoCAD. The filter consisted of: a 90 ° elbow of 1/2", a solid retainer of 11 [mm] long, a column 152.4 [mm] long and internal diameter 11 [mm], spheres of 3.5 [mm] in diameter, and a 1/2 "to 1/4" reducer. Once the geometry was obtained, it was imported to COMSOL Multiphysics ® software to carry out two dynamic studies within the column. The first study consisted in describe the behavior of the fluid inside the system, considering a turbulent model. For this, the *Fluid Flow* module was used, with the turbulent flow interface *Turbulent Flow k- ω* . The second study allowed quantification of the filtration efficiency based on the retention of particles of a generic contaminant with varied sizes in the filter. For this case, the *Particle Trace for Fluid Flow* model was used, which quantified the percentage of particles retained in a time interval. Finally, profiles of pressure, velocity and the filtering effectiveness of the system were obtained.

Keywords: Filter, Computational Fluid Dynamics (CFD), *Turbulent Flow k- ω* , *Particle Trace for Fluid Flow*, velocity and pressure profiles, filtering effectiveness.

Tabla de Contenido

1. Introducción	9
2. Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)	13
3. Modelado de sistemas turbulentos	13
4. Modelo de Flujo Turbulento k- ω (Turbulent Flow, k- ω)	17
5. Modelo Particle Tracing for Fluid Flow en COMSOL Multiphysics ®	18
6. Resolución de ecuaciones diferenciales: Método de elementos finitos	20
7. Método Iterativo de resolución de ecuaciones diferenciales en COMSOL Multiphysics ®	21
8. Metodología	22
8.1 Desarrollo de la geometría de filtro en el software INVENTOR de AutoCAD”	23
8.2 Modelado del sistema en el software COMSOL Multiphysics ®	25
9. Resultados y Discusión	30
9.1 Estudio de Flujo Turbulento k- ω	30
9.2 Estudio Particle Tracing for Fluid Flow	35
10. Conclusiones y recomendaciones	40
11. Agradecimientos	42
11. Bibliografía	43
12. Anexos	45
12.1 Modeling Instruction for Turbulent flow, k-w (spf)	45
12.2 Modeling Instruction for Particle Tracing for Fluid Flow (fpt)	50

Índice de Tablas

Tabla 1. Porcentajes de cobertura de agua y saneamiento en el Ecuador. FUENTE (SENAGUA, 2012).....	10
Tabla 2. Valores para los parámetros del modelo turbulento.....	25
Tabla 3. Valores de la probabilidad de transmisión con respecto al tamaño de partícula	36
Tabla 4. Valores para las medidas de los aportes por el mecanismo de difusión en base a lo diferentes tamaños de partícula	37
Tabla 5. Valores para las medidas de los aportes por el mecanismo de intercepción en base a los diferentes tamaños de partícula	38
Tabla 6. Valores para el mecanismo de Sedimentación en base a lo diferentes tamaños de partícula.....	39

Índice de Figuras

Figura 1. Índices de mortalidad por cólera desde 1991 hasta 2011 en Latinoamérica. FUENTE (Harvez & Avila, 2013).....	10
Figura 2. Ilustración de los regímenes de fluido y las distintas regiones que se forman en el régimen turbulento. FUENTE: (Frei, 2017)	14
Figura 3. Visualización de la malla sobre las esferas de 3.5[mm] de diámetro dentro del filtro de 152.4[mm] de largo. La malla está formada por elementos finitos, y cada elemento finito está unido por varios nodos.....	21
Figura 4. Ejemplo de convergencia de la estimación del error vs el número de iteración	22
Figura 5. a) Diseño del codo de 90° de ½”, b) Diseño de la columna de 152.4[mm] de largo y diámetro interno 11[mm], c) Diseño del reductor de ½” a ¼”	24
Figura 6. a) Diseño del empaquetamiento para la columna de 152.4[mm] de largo y diámetro interno 11[mm]. Con esferas de 3.5[mm] de diámetro, b) Diseño del ensamble de todas las partes del filtro	24
Figura 7. Corte transversal del campo de velocidad en el filtro en unidades de [m/s] ..	31
Figura 8. Perfil de velocidad a la entrada del filtro (codo de ½”) en base a distintos tiempos de simulación.....	32
Figura 9. Perfil de velocidad dentro del filtro (lecho empacado) en base a distintos tiempos de simulación.....	33
Figura 10. Perfil de velocidad a la salida del filtro (reductor de ½” a ¼”)	34
Figura 11. Corte transversal del campo de presión en el filtro en unidades de [Pa]	35
Figura 12. Gráfica del porcentaje de retención vs tamaño de partícula	36
Figura 13. Gráfica de la medida de aporte por difusión vs tamaño de partícula	38
Figura 14. Gráfica de la medida de aporte por intercepción vs tamaño de partícula.....	39
Figura 15. Gráfica de la medida de aporte por sedimentación vs tamaño de partícula .	40

1. Introducción

Alrededor de 225.000 toneladas de residuos sólidos son producidos diariamente por un aproximado de 300 millones de habitantes latinoamericanos (K. Reynolds, 2002). Lamentablemente de esta cantidad exorbitante de contaminación, menos del 5% de las aguas servidas son tratadas en las ciudades latinoamericanas (K. Reynolds, 2002). La falta de procesamiento del agua y su exposición al medio ambiente tanto en zonas urbanas como rurales causa serios riesgos de enfermedades y contaminación. Entendiéndose como contaminación no simplemente a las aguas servidas, sino en el suelo y fuentes acuíferas subterráneas. Dentro de este contexto es preciso definir al término saneamiento, ya que se empleará con frecuencia más adelante. Por saneamiento se entiende a las instalaciones y servicios que permiten eliminar sin riesgo los desechos producidos por el ser humano (orina y heces) (OMS/UNICEF, 2015).

En Ecuador, se proyecta que tomará 10 años alcanzar una cobertura de saneamiento universal en el país en base al último censo realizado por la Secretaría de Aguas en el 2014 (SENAGUA, 2012). La Tabla 1 presenta el porcentaje de agua potable y saneamiento en cada una de las zonas del país, definiéndose como:

- **Zona Grande:** mayor a 300.000 habitantes
- **Zona Mediana:** Entre 50.000 y 300.000 habitantes
- **Zona Pequeña:** Entre 15.000 y 50.000 habitantes
- **Zona Micros:** Menor a 15.000 habitantes

Es preciso mencionar en términos generales que el saneamiento en el Ecuador ha presentado un incremento en los últimos años, sin embargo, aún existen zonas como: región rural amazónica y la región rural de la costa en donde el saneamiento es precario. Por ende, la acumulación de aguas servidas es mayor al igual que el índice de enfermedades y contaminación.

Uno de los problemas que presentan las aguas residuales es su alto contenido de microorganismos patógenos en forma de bacterias o virus. Estos organismos ocasionan enfermedades que sin el seguimiento médico respectivo pueden ser mortales. Entre las enfermedades más conocidas acusadas por la ingesta de aguas negras se pueden mencionar: la gastroenteritis, el cólera, la hepatitis, etc (K. Reynolds, 2002). Siendo la segunda una de las enfermedades que presenta mayor índice de mortalidad. A partir del periodo de 1991 al 2011 en Latinoamérica se registraron 1.839.037 casos de cólera, con 19.538 muertes y una letalidad de 1.06% (Harvez & Avila, 2013). En la Figura 1 se

observa la tasa de mortalidad en los distintos años por cólera, desde 1991 hasta el 2011 en Latinoamérica.

Tabla 1. Porcentajes de cobertura de agua y saneamiento en el Ecuador. FUENTE (SENAGUA, 2012)

CONCEPTO	COBERTURAS URBANAS		COBERTURAS RURALES	
	AGUA	SANEAMIENTO	AGUA	SANEAMIENTO
Región Sierra	99,20%	94,92%	92,16%	81,58%
Grandes	99,48%	97,38%	95,66%	91,67%
Medianos	98,94%	93,43%	90,89%	75,69%
Pequeños	98,25%	83,62%	90,84%	80,66%
Micro	97,95%	82,39%	89,01%	74,11%
Región Costa	91,19%	62,63%	57,99%	61,7%
Grandes	95,42%	75,04%	66,68%	78,0%
Medianos	86,99%	54,47%	59,02%	63,4%
Pequeños	95,75%	65,47%	72,37%	60,4%
Micro	89,37%	38,52%	53,73%	55,5%
Región Amazónica	92,56%	75,33%	59,35%	54,9%
Medianos	89,77%	70,20%	44,58%	52,6%
Pequeños	96,64%	84,34%	71,09%	56,4%
Micro	95,30%	79,60%	62,21%	55,5%
Región Insular	98,21%	36,91%	79,50%	90,9%
Pequeños	99,23%	84,02%	87,80%	89,1%
Micro	97,49%	3,77%	76,66%	91,6%

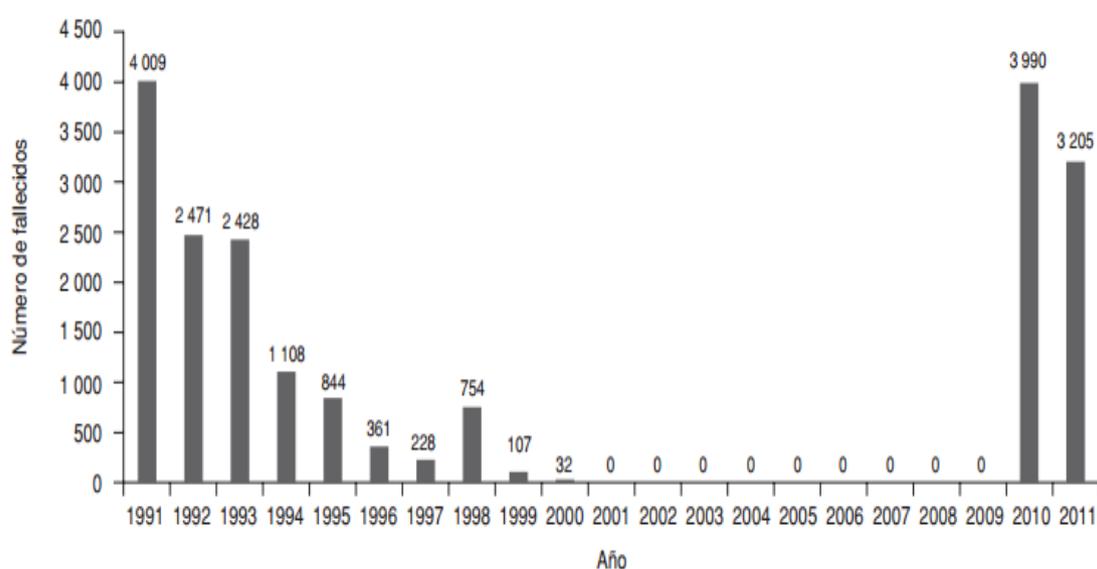


Figura 1. Índices de mortalidad por cólera desde 1991 hasta 2011 en Latinoamérica. FUENTE (Harvez & Avila, 2013)

Según Harvez y Ávila (Harvez & Avila, 2013), las tasas de mortalidad infantil y el índice de desarrollo humano (IDH) se relacionan con la propagación de la cólera, la cual ha sido mayor en los países con tasas de mortalidad infantil altas (> 40 por 1000 nacidos vivos), como: Bolivia, Perú, Brasil, Nicaragua, Guatemala, Ecuador y El Salvador (Harvez & Avila, 2013). El agua y alimentos contaminados fueron la causa principal de mortalidad infantil en los países recién mencionados. Problema que a su vez está asociado a los precarios sistemas sanitarios y elevados niveles de pobreza (Harvez & Avila, 2013). Los países con un IDH menor a 0,720 (Perú, Nicaragua, Guatemala, Bolivia, El Salvador y Honduras) presentaron incidencias de cólera mayores. La relación inversa se vio en países con un IDH mayor a 0,850, un producto interno bruto (PIB) per cápita superior a los US\$ 2000 y una tasa de alfabetización femenina mayor de 90%, como Argentina, Chile y Costa Rica, donde se presentaron las más bajas incidencias de cólera en Latinoamérica (Harvez & Avila, 2013).

A partir de lo mencionado, se observa que si bien un alto índice de desarrollo humano (IDH), tasas de alfabetización y un elevado producto interno bruto (PIB) determinan condiciones favorables para impedir epidemias de cólera. Las aguas contaminadas y las deficiencias en los servicios sanitarios son la razón primordial para una mayor incidencia de mortalidad por cólera y tasas de mortalidad infantil. Por ende, es preciso tomar acciones en búsqueda del desarrollo de tratamientos de aguas servidas para reducir estos índices en Latinoamérica.

Entre las diferentes formas de tratamiento de aguas negras se encuentran el uso de filtros para disminuir el número contaminantes y microorganismos patógenos presentes en las aguas servidas. En breve, la función de un filtro radica en atrapar la mayor cantidad de partículas contaminantes en su interior, disminuyendo su concentración en las aguas servidas. Una de las técnicas más utilizadas es la filtración granular con medio poroso. El cual consiste en un proceso de separación sólido-fluido aplicado para la remoción de ciertas partículas presentes en varios tipos de fluidos (Ramarao, 2007). Una característica importante del filtrado granular es que debido a la relativa abundancia de la sustancia granular, la cual es resistente a la temperatura y corrosión; se favorece el tratamiento de corrientes a altas temperaturas y con compuestos corrosivos (Ramarao, 2007).

Debido al efecto de deposición de las partículas en el medio poroso la porosidad disminuye con lo cual la estructura del medio filtrante varía significativamente. Esto a su

vez produce la caída de la presión que es compensada manteniendo una alimentación constante del fluido a tratar (Ramarao, 2007).

Para describir la operación de filtración granular se debe considerar tanto la fuerza de la gravedad como de la presión aplicada al fluido a través del medio filtrante. Sin embargo, la interacción del fluido con el medio filtrante presenta un conjunto de fuerzas adicionales que deben también tomarse en consideración para elaborar un análisis detallado del comportamiento del medio filtrante con el fluido. La fuerza de arrastre, las fuerzas Brownianas, y las fuerzas de Van der Waals son ejemplos de lo mencionado anteriormente (Messina, Icardi, Marchisio, & Sethi, 2012). Adicional a esto el transporte de las partículas dentro de un medio filtrante puede ser descrito por los siguientes mecanismos: difusión, sedimentación, intercepción, impacto inercial, acción hidrodinámica y mecanismos de transporte combinados (Maldonado, 2004).

Cabe resaltar que las dimensiones del filtro se obtuvieron del trabajo de Vargas, M., Murayama M., *et al.* (2015). *Nanoscale structural / chemical characterization of manganese oxide surface layers and nanoparticles, and the associated implications for drinking water*. En este estudio se analiza el comportamiento de reacciones químicas en filtros con lecho empacado esférico con diámetros que varían desde 1 hasta 3 [mm]. Se utilizó esferas de 3,5 [mm] de diámetro en el presente proyecto, ya que comercialmente es más accesible encontrar esferas de este diámetro en comparación a las utilizadas en el trabajo de Vargas, M., Murayama M., *et al.* Esta elección es primordial para una futura construcción del prototipo del filtro.

Para el presente proyecto se estudió computacionalmente un sistema cilíndrico con esferas de 3.5 [mm] de diámetro en su interior, con la finalidad de simular un sistema de filtrado de agua para la remoción de un contaminante genérico considerando distintos tamaños de partícula. Mediante el estudio dinámico del comportamiento de un fluido a través del medio filtrante en el modelo propuesto, se determinó el tamaño de partícula del contaminante para el cual el filtro funciona de manera más óptima. Para ello se establecieron los siguientes objetivos específicos: **i)** Generar una representación tridimensional de un prototipo propuesto mediante el software INVENTOR de AutoCAD. **ii)** Aplicar las ecuaciones de transporte de momento, parámetros, constantes y condiciones adecuadas para la simulación del fenómeno de filtración. **iii)** Emplear el módulo *Flujo Turbulento k- ω* con el fin de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes y el

módulo *Particle Tracing for Fluid Flow* para cuantificar la efectividad del filtro en función del tamaño de partícula. **iv)** Construir un mallado de la geometría propuesta para emplear las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo turbulento. **v)** Determinar los perfiles de velocidad y cambios de presión. **vi)** Cuantificar tres mecanismos de transporte de partículas: difusión, intercepción y sedimentación.

2. Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)

La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) es una disciplina que se encarga del análisis de sistemas que involucran transporte de fluidos, transferencia de masa, calor y fenómenos relacionados, tal como reacciones químicas mediante el uso de modelos matemáticos implementados en algoritmos computacionales (Jairo Osorio, 2012). Algunos de los paquetes computacionales más conocidos para esta disciplina son: COMSOL Multiphysics®, Fluent y Ansys; los mismo que permiten estudiar de forma detallada un sistema y obtener una descripción cercana a su comportamiento real.

Es importante mencionar que antes de iniciar un estudio es indispensable establecer las condiciones del sistema, el tipo de fluido que se está analizando, condiciones de borde, material del sistema, geometría, entre otros. Debido a que todos estos factores determinan las ecuaciones y modelos matemáticos que se deben utilizar para describir los fenómenos del sistema.

3. Modelado de sistemas turbulentos

Para comprender el modelo matemático que se utilizó para simular el comportamiento del fluido dentro del sistema. Es preciso comprender la teoría tras el modelado de un sistema turbulento. Existen distintos regímenes de fluido, los cuales están relacionados estrechamente con el número de Reynolds. La asignación numérica para cada uno de los regímenes fue reportada por primera vez en 1883 por Osborne Reynolds (N. D. E. Reynolds, David, & Díaz, 2015), quien estableció la siguiente ecuación para determinar el tipo de flujo en base a un número adimensional definido como:

$$Re = \frac{\rho VL}{\mu} \quad (1)$$

donde

ρ = Densidad del fluido [kg/m^3]

V = Velocidad del fluido [m/s]

L = Longitud de la tubería [m]

μ = Viscosidad dinámica del fluido [Pa s]

Con ello se estableció que un fluido es laminar cuando el valor del número de Reynolds es ($\text{Re} \leq 2000$) de transición ($2000 \leq \text{Re} \leq 4000$) o turbulento ($\text{Re} \geq 4000$) (N. D. E. Reynolds et al., 2015).

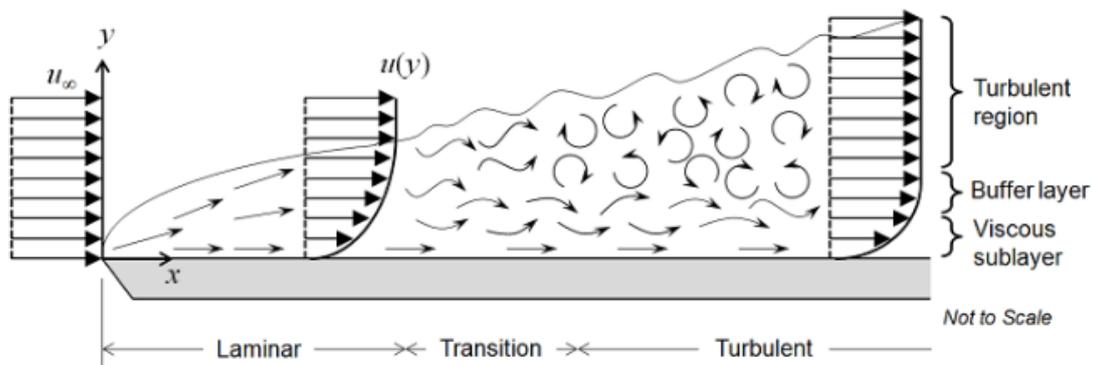


Figura 2. Ilustración de los regímenes de fluido y las distintas regiones que se forman en el régimen turbulento.
FUENTE: (Frei, 2017)

Cuando se considera un fluido en estado laminar resulta relativamente sencillo predecir el comportamiento del mismo en base a las ecuaciones de Navier-Stokes (M. Sajben, 1977). Estas ecuaciones gobiernan el movimiento de los fluidos y pueden ser descritas en base a la segunda ley de Newton del movimiento de fluidos.

$$\underbrace{\rho \left(\frac{\delta \mathbf{u}}{\delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right)}_1 = \underbrace{-\nabla p \mathbf{I}}_2 + \underbrace{\nabla \left((\mu + \mu_T) (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{I} - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \right)}_3 + \underbrace{F}_{\mathbf{e}_4} \quad (2)$$

donde

\mathbf{u} = Vector de velocidad del fluido [m/s]

ρ = Densidad del fluido [kg/m^3]

p = Presión del fluido [Pa]

μ = Viscosidad dinámica del fluido [Pa s]

μ_T = Viscosidad turbulenta [Pa s]

k = Energía turbulenta cinética [m^2/s^2]

T = Periodo de tiempo [s].

\mathbf{I} = Matriz Identidad

El primer término de la ecuación (2) corresponde a las fuerzas inerciales, el segundo término a las fuerzas de presión, el tercero señala las fuerzas viscosas y el cuarto término considera las fuerzas externas aplicadas al fluido.

Cabe resaltar que las ecuaciones de Navier-Stokes siempre son resueltas con la ecuación de continuidad, las cuales consideran la conservación de masa:

$$\frac{\delta \rho}{\delta t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3)$$

Cuando se trata de un fluido incompresible las ecuaciones (2) y (3) se modifican de la siguiente manera:

$$\rho \left(\frac{\delta \mathbf{u}}{\delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p \mathbf{I} + \nabla \cdot \left[(\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \right] + F \quad (4)$$

$$\rho \nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0 \quad (5)$$

Obteniendo finalmente la siguiente ecuación:

$$\rho \left(\frac{\delta \mathbf{u}}{\delta t} \right) = -\nabla p \mathbf{I} + \nabla \cdot \left[(\mu + \mu_T) - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \right] + F \quad (6)$$

Las resoluciones de estas ecuaciones permiten obtener los valores de velocidad y presión de un fluido en un determinado sistema. A medida que el fluido tiende al régimen turbulento; la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes se torna más complicada debido a la formación de vórtices y la presencia de fuerzas externas.

Si observamos la Figura 2 es posible visualizar que a medida que el fluido tiende al régimen turbulento se presentan pequeños vórtices y la escala de tiempo de las oscilaciones se hacen tan pequeñas que no se pueden describir computacionalmente el sistema empleando las ecuaciones de Navier-Stokes (Frei, 2017). Para ello se utiliza la

formulación RANS (*Reynolds-average Navier-Stokes formulation*), la cual promedia los campos de velocidad y presión en el tiempo (M. Sajben, 1977).

La formulación RANS esta descrita de la siguiente manera:

$$\rho \left((\mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U}) + \nabla (\mu_T (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T)) - \frac{2}{3} \mu_T (\nabla \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) = -\nabla P + \nabla \cdot \left(\mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \mathbf{U}) \mathbf{I} \right) + F \quad (7)$$

donde

\mathbf{U} = Vector de velocidad promedio [m/s]

P = Presión promedio [Pa]

La viscosidad turbulenta μ_T ; se debe a los efectos a pequeña escala de la velocidad los cuales no son resueltos por la formulación RANS (T.J. Bogar, 1983). En vista de esto existen varios modelos de turbulencia para evaluar el término μ_T .

A continuación, se describen algunos de estos modelos:

- *L-VEL and yPlus*: Calcula el valor de la viscosidad turbulenta en base a expresiones algebraicas para la velocidad local del fluido y distancias cercanas a las paredes del sistema. Brinda buenas aproximaciones para flujos dentro de geometrías cerradas (flujos internos).
- *Spalart-Allmaras*: Desarrollado con fines aerodinámicos, es un modelo estable que brinda una buena convergencia de las soluciones. No calcula con precisión campos de velocidad que presenten flujo separado, decaimiento de turbulencia y flujo cortante (Frei, 2017).
- *k-ε*: El modelo resuelve ecuaciones algebraicas para dos variables: k , energía cinética turbulenta; y ε , tasa de disipación turbulenta. Este modelo es utilizado para aplicaciones industriales porque presenta una buena convergencia y pocos requerimientos de memoria del computador (Frei, 2017). No es preciso para flujos que presentan gradientes de presión adversos, flujos con grandes curvaturas y flujos jet.
- *k-ω*: Similar al modelo *k-ε*, pero resuelve para la variable ω - tasa específica de disipación de energía cinética. Es un modelo no lineal; y es útil en situaciones donde el modelo *k-ε* no es preciso.

- *Low Reynolds Number k-ε*: Resuelve el flujo en cualquier parte del sistema. Necesita de un mallado extensivo en toda la geometría, por lo cual requiere de una gran cantidad de memoria del computador en donde se lleva a cabo la simulación. El modelo calcula fuerzas de arrastre, y pueden ser modelados con gran precisión los flujos de calor en comparación al modelo $k-ε$ (Frei, 2017).

Para el presente proyecto se empleó el Modelo de Flujo Turbulento $k-ω$ debido a su precisión y grado de convergencia para flujos con grandes curvaturas y gradientes de presión adversos.

4. Modelo de Flujo Turbulento $k-ω$ (*Turbulent Flow, k-ω*)

Este modelo define la viscosidad turbulenta de la siguiente manera:

$$\mu_T = \rho \frac{k}{\omega} \quad (8)$$

donde

k = Energía turbulenta cinética [m^2/s^2]

ω = Tasa específica de disipación de energía cinética [1/s]

La energía cinética turbulenta está descrita de la siguiente manera:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)k = P_k - \beta_0^* \rho \omega k + \nabla \cdot [(\mu + \sigma_k^* \mu_T) \nabla k] \quad (9)$$

La tasa específica turbulenta se expresa de la siguiente manera:

$$\rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\omega = \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta_0 \rho \omega^2 + \nabla \cdot [(\mu + \sigma_\omega \mu_T) \nabla \omega] \quad (10)$$

donde

ρ = Densidad del fluido [kg/m^3]

\mathbf{u} = Velocidad promedio [m/s]

μ = Viscosidad dinámica del fluido [Pa s]

μ_T = Viscosidad turbulenta [Pa s]

k = Energía turbulenta cinética [m^2/s^2]

ω = Tasa específica de disipación de energía cinética [1/s]

β_0^* , σ_k^* , σ_ω , α , β_0 , K_v , B = Parámetros del modelo turbulento

P_k se define con la siguiente ecuación:

$$P_k = \mu_T [\nabla \mathbf{u} \cdot (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] - \frac{2}{3} \rho k \nabla \mathbf{u} \quad (11)$$

Resolviendo la ecuación (8) en base a las ecuaciones (9) y (10) es posible obtener el valor numérico para la viscosidad turbulenta μ_T ; expresión que después será reemplaza en la ecuación (4).

La ventaja de este modelo turbulento es que cuantifica de manera más precisa los cambios de presión y velocidad los flujos internos, flujos con curvaturas pronunciadas, flujos separados, entre otros (Frei, 2017). Por esta razón se escogió este modelo para la resolución del flujo a través de nuestro sistema, ya que permitió cuantificar las pérdidas de presión y flujos de velocidad en el sistema precisamente. Cabe resaltar que la resolución de las ecuaciones (7), (9) y (10) son en base a métodos iterativos, de los cuales se hablará más adelante.

5. Modelo *Particle Tracing for Fluid Flow* en COMSOL Multiphysics ®

El modelo matemático utilizado para cuantificar la eficiencia de filtrado del sistema se denomina *Particle Tracing for Fluid Flow*. La ventaja que brinda este modelo dentro del software COMSOL Multiphysics ® es que permite rastrear la trayectoria de partículas en presencia de un campo externo. Para este caso el campo externo es el fluido que atraviesa el sistema.

Por lo tanto, la finalidad de utilizar este modelo radica en el hecho de que permite agregar al filtro un número específico de partículas esféricas con masa, radio y densidad. Seguidamente para asignarles una velocidad inicial y obtener las trayectorias de las partículas a través del sistema. Posterior a esto, se determinará el porcentaje de partículas que permanecen dentro del filtro cuando el fluido atraviesa el sistema en base a una función de probabilidad.

La ecuación que rige el modelo (momento de una partícula) se deriva de la segunda ley de Newton, la cual indica que la fuerza neta sobre una partícula es igual a su tasa de

cambio de momento lineal en un intervalo de tiempo (“The Particle Tracing Module User’s Guide,” n.d.). La ecuación se presenta a continuación:

$$m_p \frac{dV}{dt} = F_D + F_g + F_{ext} \quad (12)$$

donde

m_p = Masa de la partícula [kg]

V = Velocidad de la partícula [m/s]

F_D = Fuerza de arrastre sobre la partícula [N]

F_g = Fuerza de gravedad [N]

F_{ext} = Fuerzas externas actuantes sobre la partícula [N]

Se define a la fuerza de arrastre con la siguiente ecuación:

$$F_D = \left(\frac{1}{\tau_p} \right) m_p (\mathbf{u} - \mathbf{V}) \quad (13)$$

donde

\mathbf{u} = Vector de velocidad del fluido [m/s]

\mathbf{V} = Vector de la velocidad de la partícula [m/s]

τ_p = Velocidad de respuesta de la partícula en el tiempo [s]

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu} \quad (14)$$

ρ_p = Densidad de la partícula [kg/m³], $\rho_p = 2200$ [kg/m³]

d_p = Diámetro de la partícula [m]. $d_p = 1 \times 10^{-6}$ [m]

En este estudio se varía el diámetro de las partículas considerando que la mayoría de los contaminantes del agua residual son partículas sólidas que en gran medida se presentan en forma coloidal (Chávez, Alma ; Jiménez, 2000). El tamaño de las partículas suspendidas varía de 0,005 hasta 100 [μm].

La fuerza de gravedad se expresa con la siguiente ecuación:

$$F_g = m_p \mathbf{g} \left(\frac{\rho_p - \rho}{\rho_p} \right) \quad (15)$$

donde

ρ_p = Densidad de los alrededores del fluido [kg/m³]

\mathbf{g} = Vector de la gravedad [m²/s]

En este proyecto únicamente se utilizaron la fuerza de arrastre y de gravedad sobre cada una partícula. No se consideró ninguna contribución de fuerzas externas. Por lo tanto, la ecuación [11] se reescribe de la siguiente manera:

$$m_p \frac{dV}{dt} = F_D + F_g \quad (16)$$

Reemplazando las ecuaciones (13) y (15) en la ecuación (16) se obtiene:

$$m_p \frac{dV}{dt} = \left(\frac{1}{\tau_p} \right) m_p (\mathbf{u} - \mathbf{v}) + m_p \mathbf{g} \left(\frac{\rho_p - \rho}{\rho_p} \right) \quad (17)$$

La ecuación (17) fue aplicada a cada una de las partículas que se agregaron al sistema. Con lo cual se obtuvo las trayectorias de cada partícula en el filtro.

6. Resolución de ecuaciones diferenciales: Método de elementos finitos

La forma para resolver ecuaciones diferenciales de alta complejidad es a través de métodos numéricos, los cuales permiten alcanzar resultados aproximados a la solución exacta de las ecuaciones diferenciales mediante el uso de algoritmos (Forsythe, 1970). Entre los diferentes métodos existentes, el de los elementos finitos (MEF) permite la descripción aproximada de un sistema considerando su geometría sobre la cual se definen un conjunto de puntos discretos a los cuales se asocian las ecuaciones diferenciales (Zienkiewicz, 1981). Entonces, este método se fundamenta en dividir el dominio general de un cuerpo en un conjunto de subdominios no intersecantes. Cada subdivisión de dominio se llama elemento finito, y cada uno tiene una serie de puntos adyacentes representativos denominados nodos, los cuales en conjunto dan paso a la formación de una malla (Bathe, 2006).

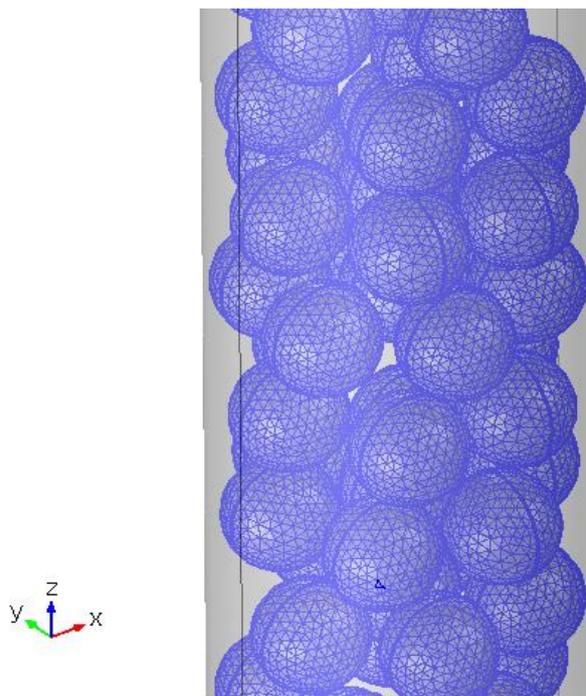


Figura 3. Visualización de la malla sobre las esferas de 3.5[mm] de diámetro dentro del filtro de 152.4[mm] de largo. La malla está formada por elementos finitos, y cada elemento finito está unido por varios nodos.

En cada nodo se define un conjunto de variables que se han relacionado en base a la adyacencia de los puntos nodales. El conjunto de variables definidas en un nodo se denomina grados de libertad (Zienkiewicz, 1981). Se puede establecer una relación entre el valor de una variable específica y los nodos; dicha relación es expresada en forma de un sistema de ecuaciones lineales que se pueden resolver mediante métodos matriciales (Bathe, 2006).

7. Método Iterativo de resolución de ecuaciones diferenciales en COMSOL Multiphysics®

En COMSOL Multiphysics® existen dos tipos de algoritmos matemáticos para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales cuando se trabaja con un problema de elementos finitos: Método Directo y Método Iterativo, de los cuales se analiza el segunda en vista de que se utilizó en el proyecto.

Este método genera una secuencia de soluciones mejoradas para el problema que se desea resolver (Amritkar, Sturler, Swirydowicz, Tafti, & Ahuja, 2015). Cuando resolvemos un problema iterativamente en COMSOL Multiphysics® es posible visualizar el error estimado de la solución en base al número de iteraciones.

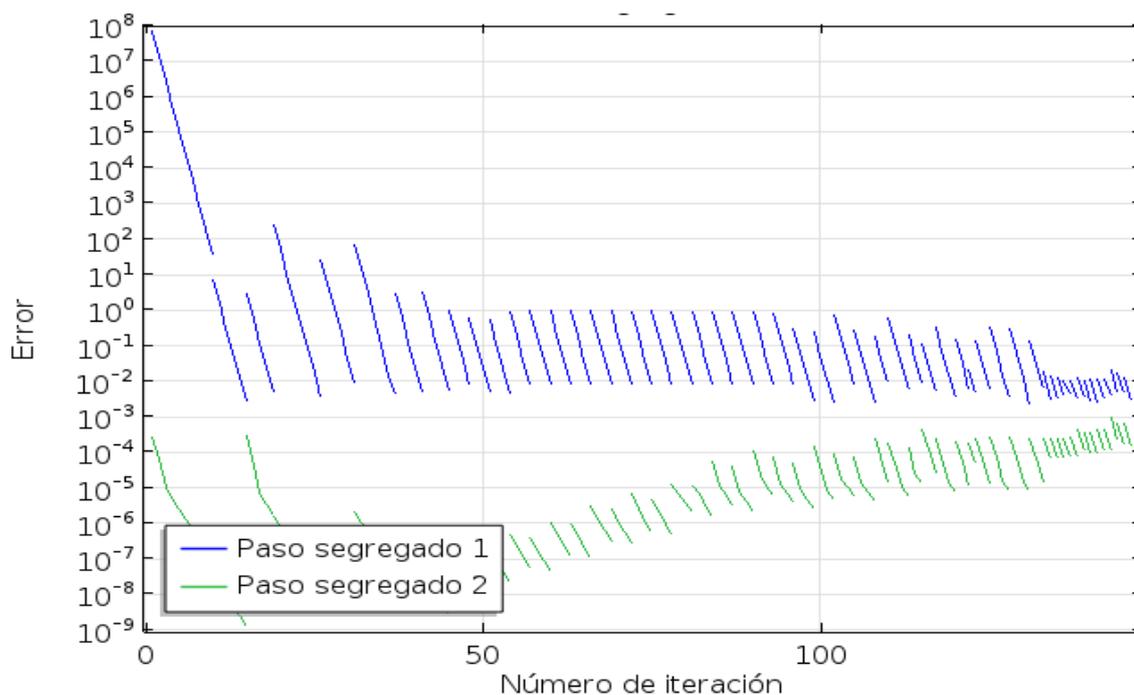


Figura 4. Ejemplo de convergencia de la estimación del error vs el número de iteración

La Figura 4 es el gráfico de convergencia de las ecuaciones del modelo del Flujo Turbulento $k-\omega$ en el sistema de filtrado donde se ha incluido dos gráficas de convergencia: Convergencia en velocidad y presión (Paso Segregado 1) y Convergencia en viscosidad turbulenta (Paso segregado 2).

Ambas cantidades tienden a un determinado valor de error (1×10^{-3}) conforme el número de iteraciones aumenta. Esta tendencia indica que la función de velocidad, presión y viscosidad turbulenta después de un número determinado de iteraciones alcanzan convergencia y por lo tanto las ecuaciones características del sistema pueden ser consideradas resueltas.

Dentro de los métodos iterativos existen varias técnicas que son empleadas para obtener una solución a un determinado sistema de ecuaciones. Una técnica iterativa no es más que un algoritmo específico que resuelve un sistema de ecuaciones de una forma en particular. En este proyecto se utilizó GMRES, debido a que el sistema de ecuaciones es no lineal.

8. Metodología

El análisis dinámico se llevó a cabo en el paquete computacional COMSOL Multiphysics®, en el cual se utilizaron dos modelos matemáticos específicos para la resolución de las

ecuaciones que comprenden al sistema de filtrado. El primer modelo permitió la obtención de perfiles de velocidad y presión dentro del filtro, *Turbulent Flow k- ω* , y el segundo cuantificó la eficiencia de filtrado del sistema, *Particle Tracing for Fluid Flow*.

Se divide a la metodología en dos partes fundamentales para la elaboración del proyecto: Desarrollo de la geometría del filtro en INVENTOR de AutoCAD y Modelado del sistema en COMSOL Multiphysics ®.

8.1 Desarrollo de la geometría de filtro en el software INVENTOR de AutoCAD”

Para elaborar un modelo del sistema, se utilizó el software INVENTOR de AutoCAD. Este programa permite al usuario construir de forma sencilla modelos 3D con cualquier tipo de geometría. El modelo del filtro consta de las siguientes partes:

- Codo de 90° de ½”.
- Retenedor de sólidos de 11 [mm] de largo.
- Columna de 152.4[mm] de largo y diámetro interno 11[mm].
- Empaquetamiento de esferas de 3.5 [mm] de diámetro (200 esferas).
- Reductor de ½” a ¼”.

Cada parte de sistema fue construida por separado para finalmente ensamblarse como un solo conjunto (Figura 5).

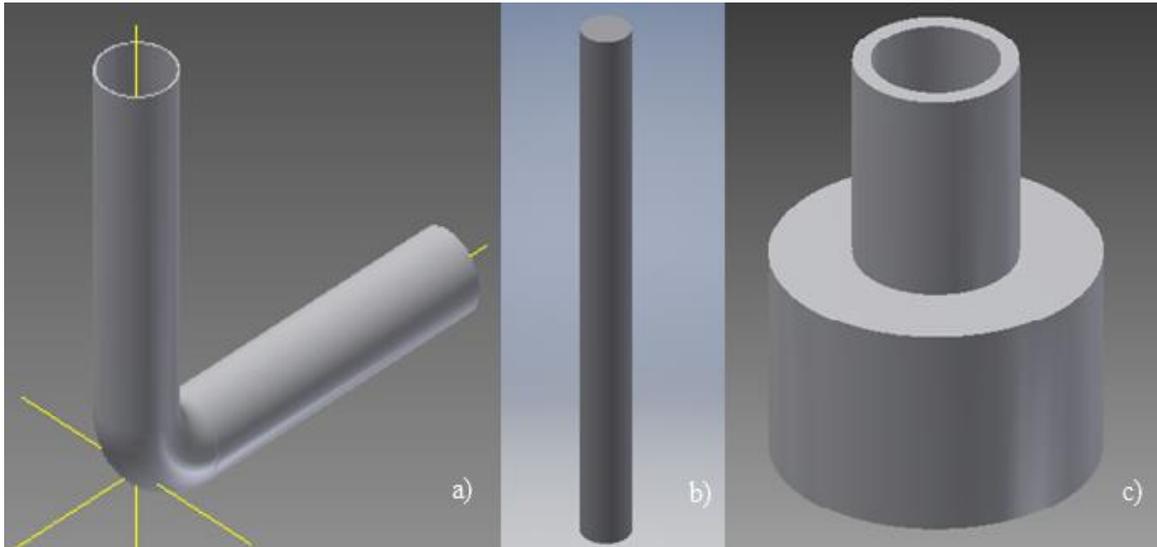


Figura 5. a) Diseño del codo de 90° de ½", b) Diseño de la columna de 152.4[mm] de largo y diámetro interno 11[mm], c) Diseño del reductor de ½" a ¼"

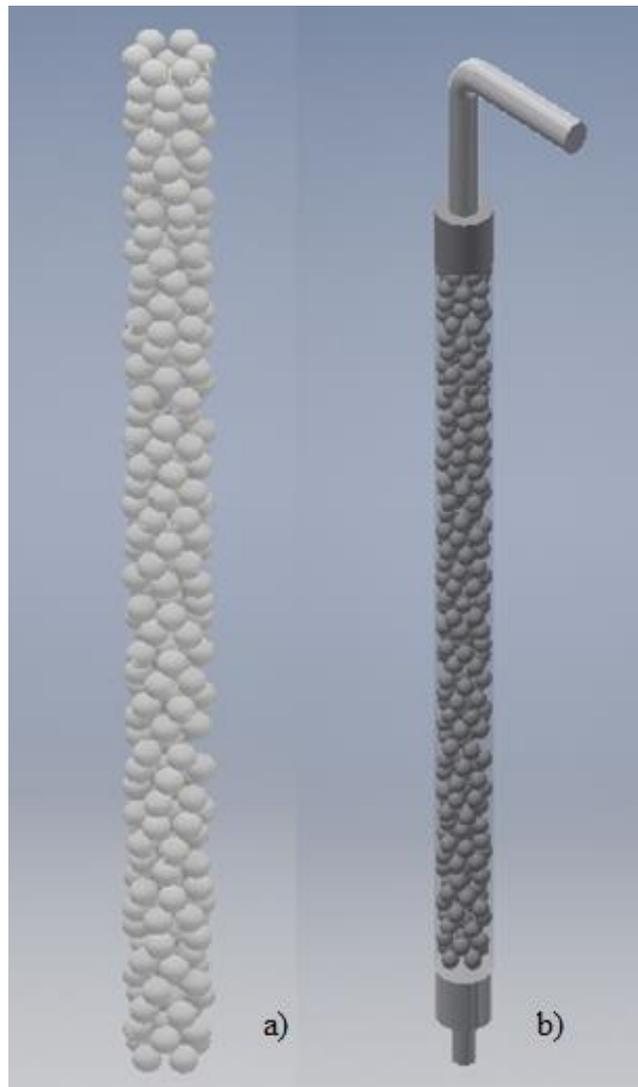


Figura 6. a) Diseño del empaquetamiento para la columna de 152.4[mm] de largo y diámetro interno 11[mm]. Con esferas de 3.5[mm] de diámetro, b) Diseño del ensamble de todas las partes del filtro

Una vez obtenido el ensamble final del filtro se importó la geometría desde INVENTOR de AutoCAD al software COMSOL Multiphysics ® para llevar a cabo los análisis dinámicos del fluido. Con respecto al fluido se seleccionó en COMSOL Multiphysics ® el tipo de fluido como agua. El programa COMSOL Multiphysics ® modeló el fluido y su comportamiento dentro del filtro en base al módulo de Flujo Turbulento $k-\omega$. Considerando que el caudal de entrada del fluido fue de 16[ml/min].

8.2 Modelado del sistema en el software COMSOL Multiphysics ®

Para el desarrollo del análisis del fluido a través del filtro y la cuantificación de la eficiencia de filtrado dentro es sistema se llevaron a cabo dos estudios: Flujo Turbulento $k-\omega$ y *Particle Tracing for Fluid Flow*.

8.2.1 Estudio de Flujo Turbulento $k-\omega$, para obtención de perfiles de velocidad y presión

Para la realización de este estudio se importó la geometría previamente diseñada en INVENTOR de AutoCAD al software COMSOL Multiphysics ®. En este software se estableció las ecuaciones diferenciales, condiciones iniciales y de borde para desarrollar el estudio. Las ecuaciones que rigen al modelo son (4)-(11).

Se emplearon los siguientes valores para los parámetros el modelo turbulento señalados en las ecuaciones (8) y (9):

Tabla 2. Valores para los parámetros del modelo turbulento

Parámetro	Valor
β_0^*	9/100
σ_k^*	1/2
σ_ω	1/2
α	13/25
β_0	9/125
K_v	0.41
B	5.2

Se establecieron como condiciones iniciales las siguientes ecuaciones:

$$\mathbf{u} = -U_0 \mathbf{n} \quad (78)$$

donde

U_0 = Velocidad de entrada del fluido, $U_0 = 0.0021$ [m/s]

\mathbf{n} = Matriz de vectores unitarios

$$U_{ref} = U_0 \quad (19)$$

$$k = \left(\frac{3}{2} U_{ref} I_T \right)^2 \quad (20)$$

donde

I_T = Intensidad turbulenta

$$\omega = \frac{k^{1/2}}{(B_0^*)^{1/4} L_T} \quad (21)$$

donde

L_T = Escala de longitud turbulenta [m]

Una condición de borde es una posición en el espacio físico en la cual se puede evaluar una ecuación diferencial con el objetivo de obtener una solución única para ese espacio en particular.

Las condiciones de borde utilizadas se denominan funciones de pared, y se presentan a continuación:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (22)$$

$$\left[(\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \right] \mathbf{n} = -\rho \frac{\mu_T}{\delta_w^+} \mathbf{u}_{tang} \quad (23)$$

$$\mathbf{u}_{tang} = \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \quad (24)$$

$$\nabla k \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (25)$$

$$\omega = \rho \frac{k}{K_v \delta_w^+ \mu} \quad (26)$$

donde

$$K_v = 0.41$$

δ_w^+ = Distancia con respecto a la pared de la geometría [m]

μ = Viscosidad fluido [Pa s]

A la salida del filtro se utilizan las siguientes condiciones:

$$\mathbf{u} = U_0 \mathbf{n} \quad (27)$$

$$\nabla k \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (28)$$

$$\nabla \omega \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (29)$$

En base a la solución de las ecuaciones (4)-(11), tomando en consideración las condiciones iniciales, de borde y a la salida del filtro se obtiene la solución para el Estudio de Flujo Turbulento $k-\omega$.

8.2.2 Estudio de *Particle Tracing for Fluid Flow*, para cuantificación de la eficiencia de filtrado

Una vez obtenida la resolución del Estudio de Flujo Turbulento $k-\omega$, se agregó la interface para calcular la trayectoria de las partículas dentro del filtro. Para ello se resuelven la ecuación (15), considerando como condición inicial a la ecuación (33):

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 \quad (30)$$

donde

\mathbf{v}_0 = Velocidad inicial de las partículas [m/s], $\mathbf{v}_0 = 0.002104$ [m/s]

Se utiliza la condición de borde “Rebotar” con lo cual las partículas rebotan al golpear las paredes del sistema. Esta condición está definida por la ecuación (31):

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_c - 2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_c)\mathbf{n} \quad (31)$$

donde

\mathbf{v}_c = Velocidad de la partícula cuando golpea la pared [m/s]

En base a la resolución de la ecuación (17), tomando en consideración las condiciones iniciales y de borde se obtiene la solución para el Estudio de *Particle Tracing for Fluid Flow*.

8.2.3 Cálculo de las medidas de aporte por los mecanismos de transporte: difusión, intercepción y sedimentación considerando distinto tamaños de partículas dentro del lecho empacado

La medida de aporte analizadas se realizó para los siguientes mecanismos de transporte: difusividad, intercepción y sedimentación. Se calculó cada aporte en base a un tamaño de partícula específico. El tamaño de partícula varió desde 1[um] hasta 100[um]. Para el cálculo de cada medida de aporte se utilizó las ecuaciones (32), (37) y (40), respectivamente:

Difusividad

$$\eta_D = 4 A_s^{1/3} P_e^{-2/3} \quad (32)$$

donde

A_s = Corrección del Factor de Happel

P_e = Número de Peclet

El factor de Happel se obtiene de la siguiente ecuación:

$$A_s = \frac{2(1 - \varphi^5)}{2 - 3\varphi + 3\varphi^5 - 2\varphi^6} \quad (33)$$

$$\varphi = (1 - \varepsilon)^{1/3} \quad (34)$$

donde

φ = Porosidad tridimensional

ε = Porosidad

El número de Peclet se obtiene de la siguiente ecuación:

$$Pe = \frac{Va d_c}{D_\infty} \quad (35)$$

$$D_\infty = \frac{k T}{3\pi d_p \mu} \quad (36)$$

donde

Va = Velocidad [m/s]

d_c = Diámetro del colector [m]. En nuestro caso es el diámetro de las esferas del lecho empacado

$k = 1,38 \times 10^{-23}$ [J/K]

T = Temperatura sistema [K]

d_p = Diámetro de la partícula [m]

μ = Viscosidad dinámica del fluido [Pa s]

Intercepción

$$\eta_I = As Lo^{1/8} Ra^{15/8} \quad (37)$$

donde

As = Corrección del Factor de Happel

Lo = Diferencia entre las fuerzas de London y Vander Waals

Ra = Relación entre el diámetro del colector y de la partícula

La diferencia entre las fuerzas de London y Vander Waals se calculó con la siguiente ecuación:

$$Lo = \frac{4 A}{9\pi \mu d_p^2 Va} \quad (38)$$

donde

$A = 1 \times 10^{-20}$ [J]

Va = Velocidad [m/s]

d_p = Diámetro de la partícula [m]

μ = Viscosidad dinámica del fluido [Pa s]

La relación entre el diámetro del colector y de la partícula se obtiene de la siguiente ecuación:

$$Ra = \frac{d_p}{d_c} \quad (39)$$

donde

d_p = Diámetro de la partícula [m]

d_c = Diámetro del colector [m]

Sedimentación

$$\eta_s = 0,00338 A_s G_R^{1,2} Ra^{-0,4} \quad (40)$$

donde

A_s = Corrección del Factor de Happel

G_R = Fuerza de gravedad

Ra = Relación entre el diámetro del colector y de la partícula

La fuerza de gravedad se calcula con la siguiente fórmula:

$$G_R = \frac{(\rho_s - \rho) g d_p^2}{18 \mu V_a} \quad (41)$$

donde

$g = 9,8$ [m/s²]

d_p = Diámetro de la partícula [m]

V_a = Velocidad [m/s]

μ = Viscosidad dinámica del fluido [Pa s]

9. Resultados y Discusión

9.1 Estudio de Flujo Turbulento $k-\omega$

9.1.1 Campo de Velocidad

Tras llevar acabo el Estudio de Flujo Turbulento $k-\omega$ se obtuvieron los siguientes resultados para el campo de velocidad:

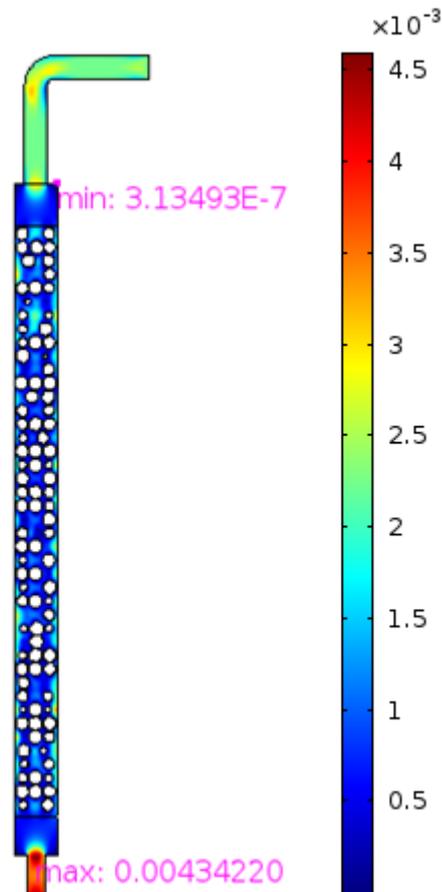


Figura 7. Corte transversal del campo de velocidad en el filtro en unidades de [m/s]

Es posible visualizar en la Figura 7 el paso del fluido a través del sistema de filtrado. Se determinó que la velocidad máxima alcanzada por el fluido en el sistema fue a la salida, $v_{max} = 0.0043$ [m/s]. Esto se debió al hecho de que a la salida del filtro no existió cuerpo geométrico alguno que impida el flujo del fluido; a diferencia del lecho empacado donde se observa una disminución considerable de la velocidad debido a las esferas contenidas en dicho espacio. La velocidad mínima registrada fue $v_{min} = 3.145 \times 10^{-7}$ [m/s]. Existe una diferencia considerable entre la velocidad máxima y mínima alcanzada. Dicha diferencia se debe a que el valor mínimo de velocidad en el sistema se considera en una región donde la velocidad del fluido es casi nula. La razón por la cual en esta zona del filtro se registra la menor velocidad se debe a que el fluido no ingresa directamente al lecho empacado, sino que se retiene antes de entrar. Tiende a acumularse en la entrada debido a que existe un caudal constante.

Para determinar la presión de operación del sistema se utiliza la ecuación (42):

$$\tau = \frac{\Delta P D}{4 L} \quad (42)$$

donde

τ = Presión de operación [Pa]

ΔP = Gradiente de presión en el sistema [Pa]

D = Diámetro del filtro [m]

L = Longitud del filtro [m]

Es importante resaltar que el valor del ΔP de la ecuación (42) fue considerado en base a los valores presentados en la Figura 11. Siendo el $\Delta P = 2,57$ [Pa]. Por lo tanto, se puede afirmar que la presión necesaria de operación del sistema es:

$$\tau = 0,0464 \text{ [Pa]}$$

También se puede calcular la fuerza necesaria de operación dividiendo el valor de presión de operación para el área transversal del filtro. En nuestro caso el área transversal es $A = 9,503 \times 10^{-5}$ [m]. El valor para la fuerza de operación obtenido fue:

$$F = 4,407 \times 10^{-6} \text{ [N]}$$

Los perfiles de velocidad en la entrada, lecho empacado y salida del filtro se presentan a continuación:

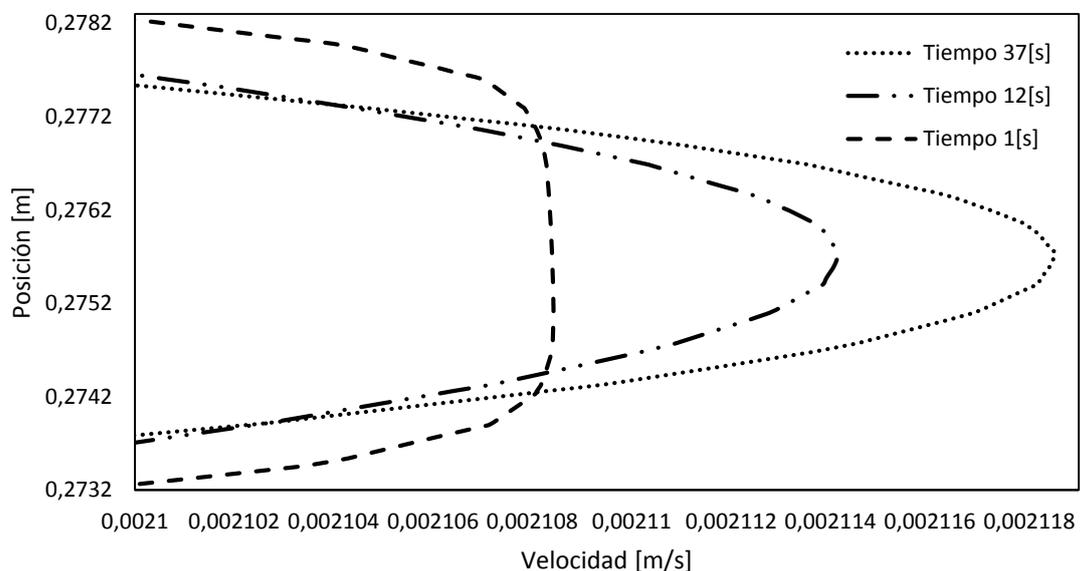


Figura 8. Perfil de velocidad a la entrada del filtro (codo de $\frac{1}{2}$ "') en base a distintos tiempos de simulación

Es posible observar en la Figura 8 la formación de un perfil de velocidad parabólico a medida que el tiempo transcurrió. Con lo cual se afirma que en la entrada del filtro el fluido no tuvo un comportamiento caótico, más bien se comportó como un fluido en

régimen laminar. Lo cual era de esperarse debido a que el número de Reynolds calculado para el codo de $\frac{1}{2}$ " fue $Re = 29.92$. La velocidad máxima alcanzada en esta sección del sistema fue $v_{max} = 0.0021$ [m/s].

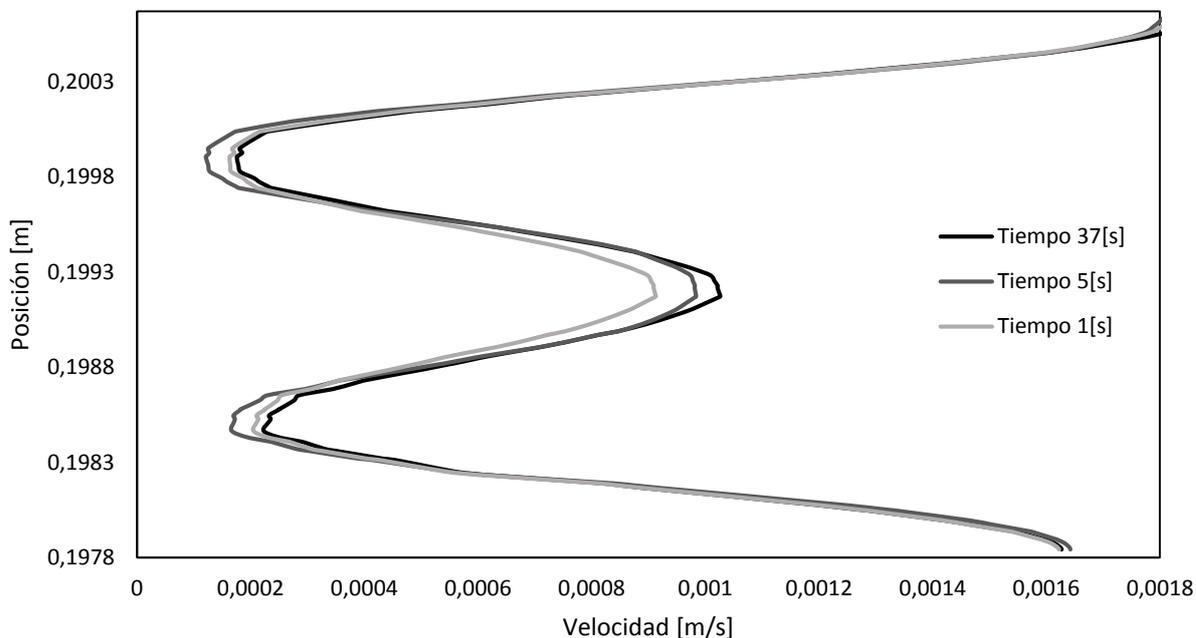


Figura 9. Perfil de velocidad dentro del filtro (lecho empacado) en base a distintos tiempos de simulación

La Figura 9 presenta la formación del perfil de velocidad del fluido en una zona dentro del lecho empacado en distintos intervalos de tiempo. En este caso el fluido tiene un comportamiento turbulento debido a que la geometría del empaquetamiento ocasiona que la velocidad del fluido aumente o disminuya según la posibilidad que tiene el fluido a transitar dentro del lecho empacado. En base a la Figura 9, las paredes del lecho empacado son las zonas en donde la velocidad presenta la máxima velocidad ($v_{max} = 0.0018$ [m/s]), debido a que el fluido fluye con mayor facilidad. A diferencia del centro del lecho empacado en donde la velocidad máxima alcanzada es $v_{max} = 0.0010$ [m/s]. Con lo cual se afirma que el fluido tiende a detenerse en el centro del empaquetamiento. Es preciso señalar el empaquetado del lecho fue aleatorio, es decir, la ubicación de las esferas dentro del sistema no tuvo un orden específico. Por ende, el perfil de velocidad de la Figura 9 puede variar con respecto a la zona del empaquetamiento que se considere para realizar el perfil.

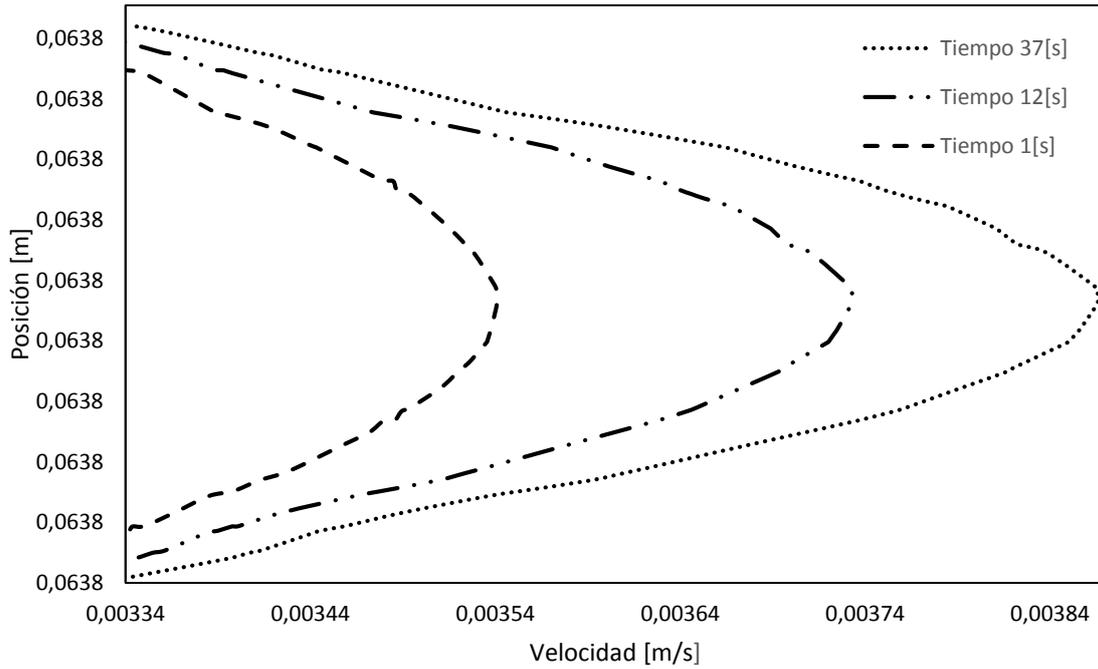


Figura 10. Perfil de velocidad a la salida del filtro (reductor de 1/2" a 1/4")

En el perfil de velocidad a la salida del filtro, ilustrado en la Figura 10, se observa que el comportamiento del fluido es laminar. Esto se debe que a la salida no existe geometría alguna que modifique el comportamiento del fluido a un régimen turbulento. La velocidad máxima alcanzada en esta sección del sistema fue $v_{max} = 0.0039$ [m/s]. Este valor de velocidad máxima fue el mayor cuantitativamente en comparación con los valores de velocidad máxima obtenidos de las Figuras 8 y 9.

9.1.2 Campo de Presión

Los resultados para el campo de presión se presentan en la Figura 11:

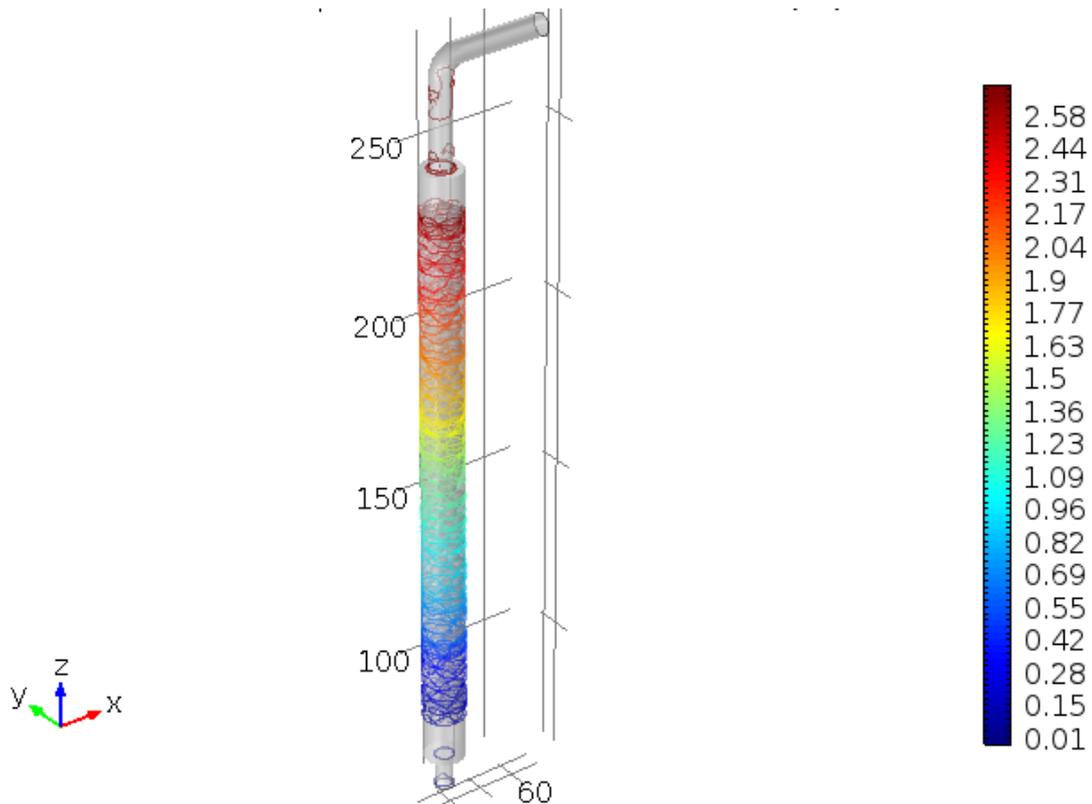


Figura 11. Corte transversal del campo de presión en el filtro en unidades de [Pa]

En la Figura 11 es posible observar que a medida que el fluido transita por el filtro la presión disminuye. El fluido ingresa al sistema y debido al empaquetamiento la presión disminuye al igual que la velocidad del fluido dentro del lecho empacado. Por lo tanto, en la entrada del filtro existe la mayor presión ($P_{entrada} = 2.578[\text{Pa}]$) y en la salida la presión es casi nula ($P_{salida} = 0.0010[\text{Pa}]$). La diferencia de presión y la fuerza de gravedad actuante en el sistema ocasionan el flujo del fluido.

9.2 Estudio *Particle Tracing for Fluid Flow*

Tras llevar a cabo el Estudio de *Particle Tracing for Fluid Flow* se obtuvieron los resultados presentados en la Tabla 3 para la eficiencia de filtrado del sistema. Cabe resaltar que el valor para la eficiencia de filtrado se obtuvo en base a un balance de masa del número de partículas en la entrada y salida del filtro. Siendo el número de partículas a la salida del filtro dividido para el número total de partículas iniciales la probabilidad de transmisión. El porcentaje de retención es la diferencia multiplicada por cien entre el valor de probabilidad menos uno.

Tabla 3. Valores de la probabilidad de transmisión con respecto al tamaño de partícula

Tamaño de partícula [μm]	Probabilidad de Transmisión	Porcentaje de Retención [%]
1	0.9490	5.100
10	0.6603	33.97
20	0.2977	70.23
30	0.1740	82.60
40	0.1007	89.93
50	0.0697	93.03
60	0.0043	99.57
70	0.0043	99.57
80	0.0043	99.57
90	0.0043	99.57
100	0.0043	99.57

En base a los resultados de la Tabla 3 es posible afirmar que conforme el tamaño de partícula aumenta la probabilidad de retención se incrementa. Por ende, a mayor tamaño de partícula mayor porcentaje de retención de las partículas dentro del sistema. Sin embargo, el hecho de que la probabilidad de retención se incremente considerablemente indica que el sistema de filtrado se satura, anulando la capacidad de filtración. Por ende, el sistema trabajaría óptimamente hasta un máximo tamaño de partícula de 50 [μm] para evitar la saturación completa. Los resultados se observan en la Figura 12:

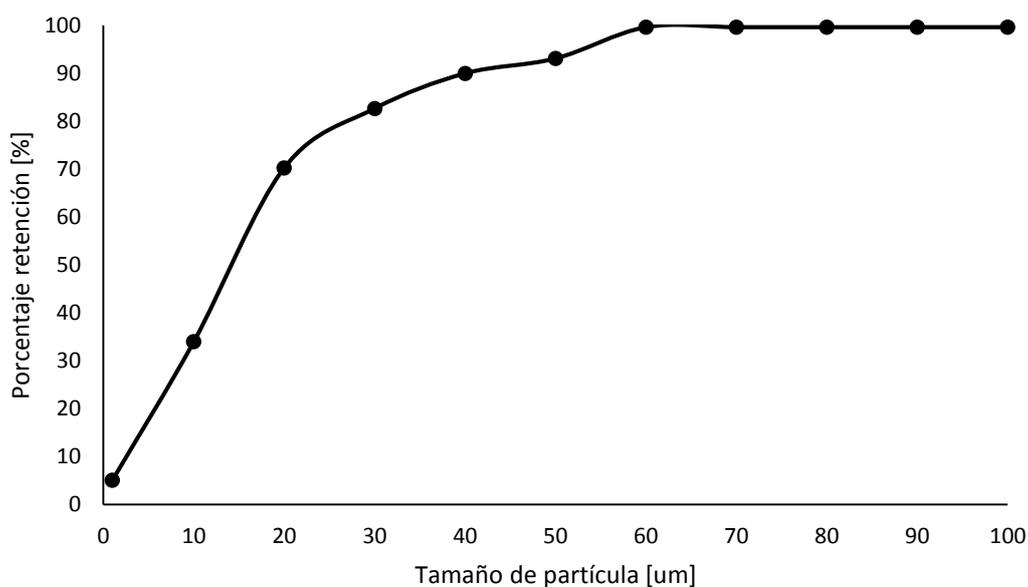


Figura 12. Gráfica del porcentaje de retención vs tamaño de partícula

9.3 Resultados para las medidas de aportes por los mecanismos de transporte: difusividad, intercepción y sedimentación de partículas de distinto tamaño dentro del lecho empacado

Se obtuvieron los siguientes resultados para los distintos aportes por los mecanismos de transporte de las en base a las ecuaciones (35), (40) y (43):

Mecanismo de transporte de partículas por difusión

Se presenta a continuación los valores calculados para el coeficiente de difusividad (D_{∞}), número de Peclet (Pe) y medida de aporte por difusión (η_D) de partículas de distinto tamaño.

Tabla 4. Valores para las medidas de los aportes por el mecanismo de difusión en base a lo diferentes tamaños de partícula

Tamaño de partícula [μm]	D_{∞}	Pe	η_D
1	4,900E-13	2,007E+07	1,00
10	4,900E-14	2,007E+08	0,22
20	2,450E-14	4,015E+08	0,14
30	1,633E-14	6,022E+08	0,10
40	1,225E-14	8,029E+08	0,09
50	9,799E-15	1,004E+09	0,07
60	8,166E-15	1,204E+09	0,07
70	6,999E-15	1,405E+09	0,06
80	6,125E-15	1,606E+09	0,05
90	5,444E-15	1,807E+09	0,05
100	4,900E-15	2,007E+09	0,05

En base a los resultados obtenidos de la Tabla 4, se observa que conforme el tamaño de partícula aumenta el aporte por difusión disminuye. Esto se debe porque a medida que el tamaño de partícula se incrementa el sistema tiende a saturarse. Por lo tanto, las partículas no se difunden, sino tienden a transportarse por otros mecanismos. La Figura 13 muestra la relación entre el aporte por difusión y el tamaño de partícula normalizado.

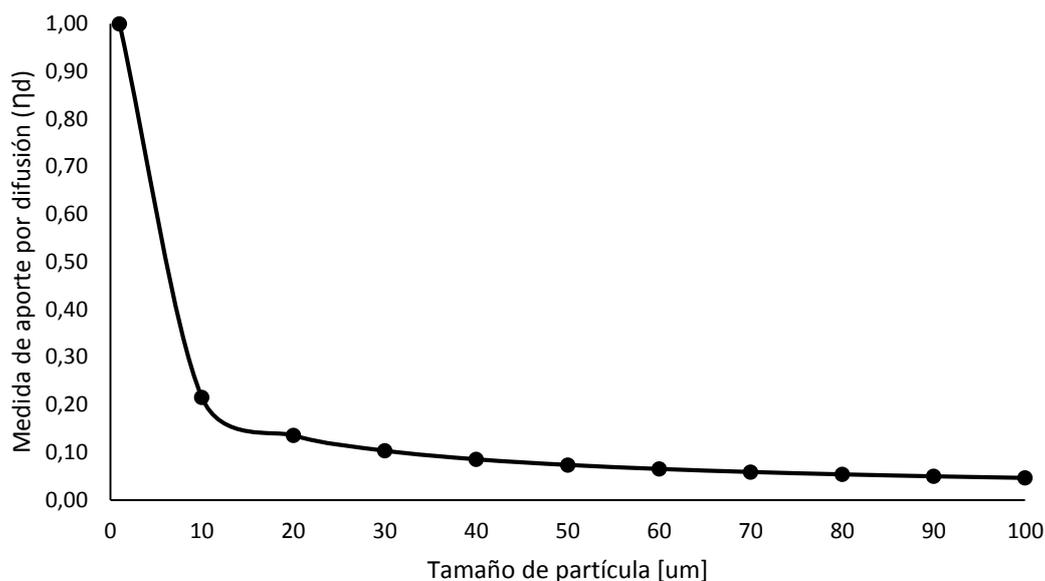


Figura 13. Gráfica de la medida de aporte por difusión vs tamaño de partícula

Mecanismo de transporte de partículas por intercepción

La Tabla 5 presenta los valores calculados para la diferencia entre fuerzas de London y Vander Walls (Lo), relación entre el diámetro del colector y el de la partícula (Ra). Así como las medidas por aporte del mecanismo de intercepción (η_I).

Tabla 5. Valores para las medidas de los aportes por el mecanismo de intercepción en base a los diferentes tamaños de partícula

Tamaño de partícula [μm]	Lo	Ra	η_I
1	0,0006	2,857E-04	0,00
10	5,6504E-06	2,857E-03	0,02
20	1,4126E-06	5,714E-03	0,07
30	6,2783E-07	8,571E-03	0,14
40	3,5315E-07	1,143E-02	0,23
50	2,2602E-07	1,429E-02	0,32
60	1,5696E-07	1,714E-02	0,44
70	1,1532E-07	2,000E-02	0,56
80	8,8288E-08	2,286E-02	0,70
90	6,9759E-08	2,571E-02	0,84
100	5,6504E-08	2,857E-02	1,00

Con respecto a las medidas de aporte por el mecanismo de intercepción se observa en la Tabla 5, que conforme el tamaño de partícula se incrementa el valor numérico de este mecanismo lo hace también. Por ende, a mayor intercepción de las partículas menor porosidad en el sistema. Este mecanismo es el responsable en mayor medida de la

saturación del sistema, ya que presenta los valores numéricos más elevados en comparación con el resto de las medidas de aportes por mecanismos de transporte analizados conforme el tamaño de partícula aumenta. La relación entre la intercepción y el tamaño de partícula normalizado se presentan en la Figura 14.

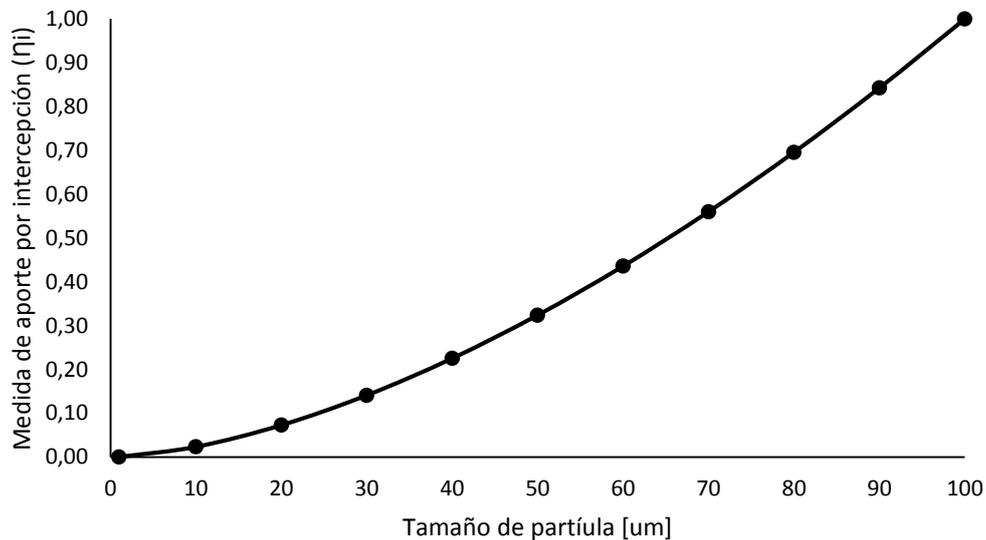


Figura 14. Gráfica de la medida de aporte por intercepción vs tamaño de partícula

Mecanismo de transporte de partículas por sedimentación

Se presenta a continuación los valores calculados para la fuerza de gravedad (G_R), y medidas de aporte por el mecanismo de sedimentación (η_s) para partículas con distinto tamaño.

Tabla 6. Valores para el mecanismo de Sedimentación en base a lo diferentes tamaños de partícula

Tamaño de partícula [μm]	G_R [N]	η_s
1	6,241E-07	2,512E-06
10	6,241E-05	1,585E-03
20	2,496E-04	1,104E-02
30	5,617E-04	3,435E-02
40	9,986E-04	7,687E-02
50	1,560E-03	1,436E-01
60	2,247E-03	2,392E-01
70	3,058E-03	3,684E-01
80	3,994E-03	5,354E-01
90	5,055E-03	7,445E-01
100	6,241E-03	1,000

Finalmente, en base a la Tabla 6 se afirma que conforme el tamaño de partícula se incrementa el aporte por el mecanismo de transporte por sedimentación es más notorio. Este aporte más las medidas por intercepción ocasionan en gran parte la saturación del sistema conforme el tamaño de partícula se incrementa. La relación entre la medida de aporte por sedimentación con respecto al tamaño de partícula normalizado se presenta en la Figura 15.

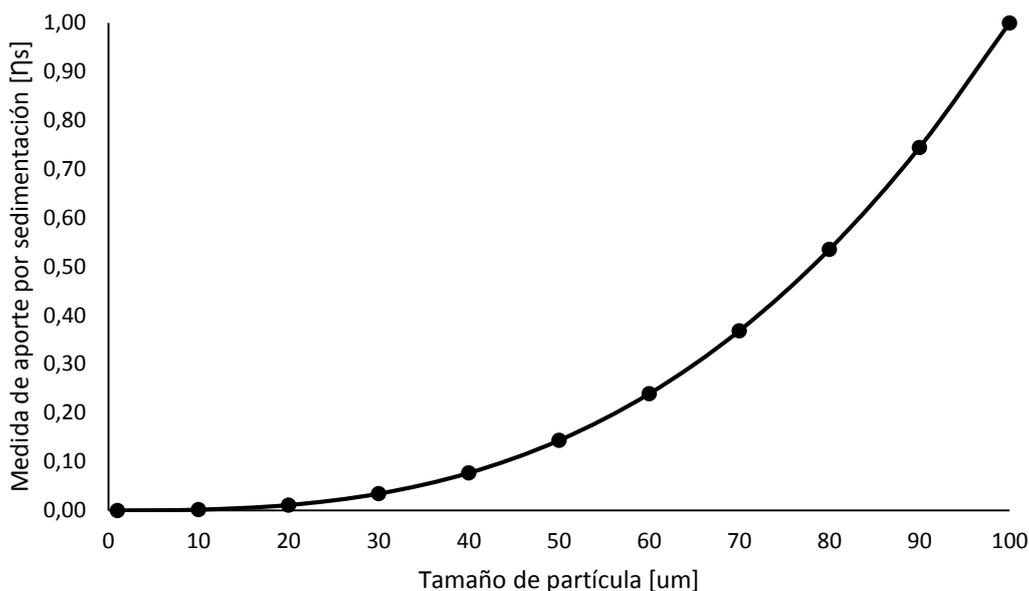


Figura 15. Gráfica de la medida de aporte por sedimentación vs tamaño de partícula

10. Conclusiones y recomendaciones

Tras llevar a cabo el proyecto se concluye que el sistema de filtrado tendría un funcionamiento óptimo para partículas con un diámetro igual o menor a 50[um], y con un porcentaje de retención máximo del 93.03[%]. Si bien a mayor tamaño de partícula el porcentaje de retención aumenta hasta 99.57[%] (Tabla 3); el filtro se saturaría completamente conforme el tiempo transcurre.

Los perfiles de velocidad obtenidos en las distintas secciones del filtro indican que tanto en la entrada (codo de ½") como en la salida (reductor ½" a ¼"), el fluido siguió un comportamiento laminar. Esto se debe a que el caudal de entrada (16 [ml/min]) fue demasiado bajo, ocasionando este comportamiento. Por otra parte, el perfil de velocidad resultante de la sección del lecho empacado indica un comportamiento turbulento del fluido, debido a que las esferas de 3.5[mm] de diámetro contenidas en esta parte del filtro alteran el comportamiento del fluido. Las paredes del lecho empacado fueron las zonas

por donde el fluido presentó mayor facilidad para fluir, debido a que las esferas y su distribución aleatoria permiten la formación de canales en estas zonas específicamente. A diferencia del centro del lecho empacado en donde las esferas se encuentran más compactas, dificultando el paso del fluido.

Se recomienda aumentar el valor del caudal de entrada del filtro para visualizar un comportamiento más semejante a la realidad en todo el sistema. También llevar a cabo un estudio detallado del mallado en el sistema. Si bien se obtuvieron buenas aproximaciones de los perfiles de velocidad, un refinamiento detallado del mallado brindaría mejores aproximaciones y mejores perfiles de velocidad.

Por otra parte, sería de gran interés llevar a cabo una reacción química en el sistema para cuantificar la conversión de reactivos a productos y el tiempo de residencia. Y comparar estos resultados teóricos con valores empíricos de literatura. Para corroborar la veracidad y credibilidad de la simulación con respecto a la realidad.

11. Agradecimientos

Este proyecto fue financiado por le USFQ Chancellor Grant 2016. Se agradece a Andrea Landázuri Ph.D por sus conocimientos impartidos y ayuda para el desarrollo de este proyecto. Al Ing. Vladimir Benavides por su apoyo para el desarrollo de este proyecto de titulación. Agradezco a mis padres por su apoyo incondicional durante todos mis años de estudio de educación superior.

11. Bibliografía

- Amritkar, A., Sturler, E. De, Swirydowicz, K., Tafti, D., & Ahuja, K. (2015). Recycling Krylov subspaces for CFD applications and a new hybrid recycling solver, (September). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.09.040>
- Bathe, K.-J. (2006). *Element* (Second Edi). United States: Prentice Hall, Pearson Education, Inc.
- Chávez, Alma ; Jiménez, B. (2000). DISTRIBUCIÓN DEL TAMAÑO DE PARTÍCULA (DTP) OBTENIDA CON LA APLICACIÓN DE PAX, (December 2014).
- Forsythe, G. (1970). *Pitfalls in Computation, or why a Math Book isn't Enough*. Mathematical Association of America.
- Frei, W. (11 de 11 de 2013). *Solutions to Linear Systems of Equations: Direct and Iterative Solvers*. Obtenido de comsol.com: <https://www.comsol.com/blogs/solutions-linear-systems-equations-direct-iterative-solvers/>
- Frei, W. (06 de 06 de 2017). *Which Turbulence Model Should I Choose for My CFD Application?* Obtenido de comsol.com: <https://www.comsol.com/blogs/which-turbulence-model-should-choose-cfd-application/>
- Harvez, C. B., & Avila, V. S. (2013). [The cholera epidemic in Latin America: reemergence, morbidity, and mortality]. *Revista Panamericana de Salud Pública = Pan American Journal of Public Health*, 33(4), 40–6. <https://doi.org/10.1590/S1020-49892013000100006>
- Jairo Osorio, M. A. (1 de 06 de 2012). *Una revisión acerca de la dinámica de fluidos computacionales (CFD) en instalaciones avícolas*. Obtenido de <http://webcache.googleusercontent.com:> <http://webcache.googleusercontent.com/search?q=cache:http://www.scielo.org.co/pdf/dyna/v79n175/v79n175a17.pdf>
- Kraichnan, R. H. (1965). Lagrangian-History Closure Approximation for Turbulence. *Physics of Fluids*, 8(4), 575. <https://doi.org/10.1063/1.1761271>
- Maldonado, V. (2004). FILTRACIÓN. In *Tratamiento de agua para consumo humano*. Lima: Centro Panamericano de Ingeniería Sanitaria y Ciencias de Ambiente. Retrieved from <http://www.ingenieroambiental.com/4014/nueve.pdf>

- Messina, F., Icardi, M., Marchisio, D., & Sethi, R. (2012). Microscale Simulation of Nanoparticles Transport in Porous Media for Groundwater Remediation. *2012 COMSOL Conference*.
- M. Sajben, J. K. (1977). A High-Speed Schlieren Investigation of Diffuser Flows with Dynamic Distortion. *AIAA*, 77-875.
- OMS/UNICEF. (2015). *Informe de actualización 2015 y evaluación del ODM*. Estados Unidos de América: Audaz. Obtenido de <http://www.who.int/topics/sanitation/es/>
- Ramarao, C. T. (2007). *Granular Filtration of Aerosols and Hydrosols*. Amsterdam: Elsevier Ltd.
- Reynolds, K. (2002). Tratamiento de Aguas Residuales en Latinoamérica Identificación del Problema. *De La Llave*, 4.
- Reynolds, N. D. E., David, J., & Díaz, J. (2015). No Title, 1–59.
- SENAGUA. (2012). Estrategia Nacional de Agua Potable y Saneamiento., 80.
- T.J. Bogar, M. S. (1983). Characteristic Frequencies of Transonic Diffuser Flow Oscillations. *AIAA Journal*, 1232-1240.
- The Particle Tracing Module User's Guide. (n.d.).
- Zienkiewicz, O. C. (1981). *El método de los elementos finitos*. Reverte.

12. Anexos

12.1 Modeling Instruction for Turbulent flow, k-w (spf)

From the **File** menu, choose **New**.

NEW

1. In the **New** window, click **Model Wizard**.

MODEL WIZARD

1. In the **Model Wizard** window, click **3D**.
2. In the **Select physics** tree, select **Fluid Flow>Single Phase Flow>Turbulent Flow>Turbulent Flow, k- ω (spf)**.
3. Click **Add**.
4. Click **Study**.
5. In the **Select study** tree, select **Present Studies>Time Dependent**
6. Click **Done**.

GLOBAL DEFINITIONS

Parameters

1. On the **Home** toolbar, click **Parameters**.
2. In the **Settings** window for Parameters, locate the **Parameters** section.
3. In the table, enter the following variable $u_0 = 0,002104$ [m/s]

GEOMETRY I

Geometry I

1. In the **Model Builder** window, expand the **Component I (compI)** node and click on **Geometry I**.
2. In the **Settings** window for Geometry, locate the **Units** section.
3. From the **Unit length** list, choose **[mm]**.

Import I

1. On the **Geometry** toolbar, click **Import**.
2. In the **Settings** window for Import, locate **Filename** and click **Browse** button to upload the geometry design of the filter from Inventor.
3. Click the **Build selected** button.

ADD MATERIAL

Water, liquid (mat1)

1. On the **Home** toolbar, click **Add Material** to open the **Add Material** window.
2. Go to the **Add Material** window.

3. In the tree, select **Built-In>Water, liquid**.
4. Click **Add to Selection** in the window toolbar.
5. In the **Settings** window for Material, locate **Geometric Entity Selection** section.
6. From **Geometric entity level** list, choose **Domain**.
7. From **Selection** list, choose **Manual**.
8. Select Domains 1,2,3, and 51.

Borosilicate (mat2)

1. On the **Home** toolbar, click **Add Material** to open the **Add Material** window.
2. Go to the **Add Material** window.
3. In the tree, select **MEMS>Insulators>Borosilicate**.
4. Click **Add to Selection** in the window toolbar.
5. In the **Settings** window for Material, locate **Geometric Entity Selection** section.
6. From **Geometric entity level** list, choose **Domain**.
7. From **Selection** list, choose **Manual**.
8. Select all domains, except 1,2,3, and 51.

TURBULENT FLOW, k- ω (spf)

Turbulent Flow, k- ω (spf)

1. In the **Model Builder** window, expand the **Component I (compI)** and click on **Turbulent Flow, k- ω (spf)**.
2. In the **Settings** window for Turbulent Flow, locate the **Domain Selection** section.
3. Select Domains 1,2,3 and 51.

Inlet I

1. On the **Physics** toolbar, click **Boundaries** and choose **Inlet**.
2. Select Boundary 507 only.
3. In the **Settings** window for Inlet, locate the **Velocity** section.
4. In the U_0 text field, type **u_in**.

Outlet I

1. On the **Physics** toolbar, click **Boundaries** and choose **Outlet**.
2. Select Boundary 140 only.

MESH I

Free Tetrahedral I

1. On the **Home** toolbar, click **Mesh>Free Tetrahedral**.
2. In the **Settings** window for Free tetrahedral, locate the **Domain Selection** section.
3. From **Geometric entity level** list, choose **Domain**.

4. From **Selection** list, choose **Manual**.
5. Select all domains, except 1,2,3, and 51.

Size I

1. In the **Model Builder** window, under **Component I (compI)>Mesh I** right click on **Free Tetrahedral I** and choose **Size** option.
2. In the **Settings** window for Size, locate the **Domain Selection** section.
3. From **Geometric entity level** list, choose **Domain**.
4. From **Selection** list, choose **Manual**.
5. Select all domains, except 1,2,3, and 51.
6. In the **Settings** window for Size, locate the **Element Size** section.
7. From **Calibrate for** list, choose **Fluid dynamics**.
8. In **Element Size** section, next to **Predefined** choose **Finer**.

Free Tetrahedral 2

1. On the **Home** toolbar, click **Mesh>Free Tetrahedral**.
2. In the **Settings** window for Free tetrahedral, locate the **Domain Selection** section.
3. From **Geometric entity level** list, choose **Domain**.
4. From **Selection** list, choose **Manual**.
5. Select Domains 1,2,3, and 51.

Size I

1. In the **Model Builder** window, under **Component I (compI)>Mesh I** right click on **Free Tetrahedral 2** and choose **Size** option.
2. In the **Settings** window for Size, locate the **Domain Selection** section.
3. From **Geometric entity level** list, choose **Domain**.
4. From **Selection** list, choose **Manual**.
5. Select Domains 1,2,3, and 51.
6. In the **Settings** window for Size, locate the **Element Size** section.
7. From **Calibrate for** list, choose **Fluid dynamics**.
8. In **Element Size** section, next to **Predefined** choose **Extra fine**.

STUDY I

Step I: Time Dependent

1. In the **Model Builder** window, expand the **Study I** node, then click **Step I: Time Dependent**.
2. Locate the **Study Settings** section. Click **Range**.
3. In the **Range** dialog box, type 0.1 in the **Step** text field.
4. In the **Stop** text field, type 40.
5. Click **Replace**.
6. On the **Home** toolbar, click Compute.

RESULTS

The following steps reproduce Illustration 11, 12, 13, 14 and 15.

Velocity (spf)

The following steps reproduce Illustration 11

Slice I

1. In the **Model Builder window**, expand the **Results>Velocity (spf)** node.
2. In the **Settings** window for Velocity, locate the **Plane data** section.
3. From the **Plane** list, choose **zx Planes**.
4. From the **Input method** list, choose **Number of planes**.
5. From the **Plane** dialog box, type **1**.
6. Click **Plot** button.

Flow Line I

1. On the **Velocity (spf)** toolbar, click **Flow Line**.
2. In the **Settings** window for Flow line, locate the **Position of flow lines** section.
3. From the **Positioning** list, choose **Controlled start point**.
4. From the **Input method** list, choose **Number of points**.
5. From the **Points** dialog box, type **50**.
6. In the **Settings** window for Flow line, locate the **Coloring and style** section.
7. From the **Color** list, choose **Blue**.
8. Click **Plot** button.

The following steps reproduce Illustration 15

Pressure (spf)

1. In the **Model Builder window**, expand the **Results>Pressure (spf)** node.
2. In the **Settings** window for Pressure, locate the **Levels** section.
3. From **Total levels** dialog box, type **100**.
4. Click **Plot** button.

The following steps reproduce Illustration 12

Cut Plane I

On the **Results** toolbar, click **Cut Plane**.

Data Sets

1. In the **Settings** window for Cut Plane, locate the **Data** section.
2. From the **Data set** list, choose **Study I/Solution 1 (sol 1)**.
3. Locate the **Plane Data** section. From the **Plane** list, choose **zx plane**.
4. From **y-coordinate** field, type **-74**.
5. Click **Plot** button.

2D Cut Line I

1. On the **Results** toolbar, click **2D Cut Line**.
2. In the **Settings** window for 2D Cut line, locate the **Data set** section.

3. From the **Data set** list, choose **Cut plane 1**.
4. In the **Settings** window for 2D Cut line, locate the **Data on line** section.
5. From the **Line input method** list, choose **Two points**.
6. From **Point 1** field, type **272.764** (x-coordinate) and **57.74** (y-coordinate).
7. From **Point 2** field, type **278.76** (x-coordinate) and **57.7518** (y-coordinate).

1D Plot Group 5

9. On the **Results** toolbar, click **1D Plot Group**.
10. In the **Settings** window for 1D Plot Group, locate the **Data set** section.
11. From the **Data set** list, choose **Study 1/Solution 1 (sol 1)**.
12. From the **Time selection** list, choose **All**.

Linear Graph 1

1. On the **1D Plot Group** toolbar, click **Linear Graph**.
2. In the **Settings** window for Linear Graph, locate the **Data set** section.
3. From the **Data set** list, choose **2D Cut Line 1**.
4. From the **Time selection** list, choose **All**.
5. In the **Settings** window for Linear Graph, locate the **y-axis information** section.
6. From **Expression** field, type **z**.
7. Click **Plot** button.

The following steps reproduce Illustration 13

2D Cut Line 2

8. On the **Results** toolbar, click **2D Cut Line**.
9. In the **Settings** window for 2D Cut line, locate the **Data set** section.
10. From the **Data set** list, choose **Cut plane 1**.
11. In the **Settings** window for 2D Cut line, locate the **Data on line** section.
12. From the **Line input method** list, choose **Two points**.
13. From **Point 1** field, type **151.975** (x-coordinate) and **44.5009** (y-coordinate).
14. From **Point 2** field, type **159.559** (x-coordinate) and **33.204** (y-coordinate).

Linear Graph 2

8. On the **1D Plot Group** toolbar, click **Linear Graph**.
9. In the **Settings** window for Linear Graph, locate the **Data set** section.
10. From the **Data set** list, choose **2D Cut Line 2**.
11. From the **Time selection** list, choose **All**.
12. In the **Settings** window for Linear Graph, locate the **y-axis information** section.
13. From **Expression** field, type **z**.
14. Click **Plot** button.

The following steps reproduce Illustration 14

2D Cut Line 3

15. On the **Results** toolbar, click **2D Cut Line**.

16. In the **Settings** window for 2D Cut line, locate the **Data set** section.
17. From the **Data set** list, choose **Cut plane 1**.
18. In the **Settings** window for 2D Cut line, locate the **Data on line** section.
19. From the **Line input method** list, choose **Two points**.
20. From **Point 1** field, type **64.023** (x-coordinate) and **41.3234** (y-coordinate).
21. From **Point 2** field, type **64.074** (x-coordinate) and **36.3823** (y-coordinate).

Linear Graph 3

15. On the **1D Plot Group** toolbar, click **Linear Graph**.
16. In the **Settings** window for Linear Graph, locate the **Data set** section.
17. From the **Data set** list, choose **2D Cut Line 3**.
18. From the **Time selection** list, choose **All**.
19. In the **Settings** window for Linear Graph, locate the **y-axis information** section.
20. From **Expression** field, type **z**.
21. Click **Plot** button.

12.2 Modeling Instruction for Particle Tracing for Fluid Flow (fpt)

ADD PHYSICS

1. On the **Home** toolbar, click **Add Physics** to open the **Add Physics** window.
2. Go to the **Add Physics** window.
3. In the **Add Physics** tree, select **Fluid Flow>Particle Tracing>Particle Tracing for Fluid Flow (fpt)**.
4. Find the **Physics interfaces in study** subsection. In the table, enter the settings:

Physics	Solve
Laminar Flow (spf)	

5. Click **Add to Component** in the window toolbar
6. On the **Home** toolbar, click **Add Physics** to close the **Add Physics** window.

ADD STUDY

1. On the **Home** toolbar, click **Add Study** to open the **Add Study** window.
2. Go to the **Add Study** window.
3. Find the **Studies** subsection. In the **Select study** tree, select **Present Studies>Time Dependent**.
4. Find the **Physics interfaces in study** subsection. In the table, enter the following settings:

Studies	Solve
Study 1	

5. Click **Add Study** in the window toolbar.
6. On the **Home** toolbar, click **Add Study** to close the **Add Study** window.

PARTICLE TRACING FOR FLUID FLOW (FPT)

On the **Physics** toolbar, click **Turbulent Flow (spf)** and choose **Particle Tracing for Fluid Flow (fpt)**.

Particle Tracing for Fluid Flow (fpt)

1. In the **Model Builder** window, under **Component I (comp I)** click **Particle Tracing for Fluid Flow (fpt)**.
2. Select Domains: 1,2,3 and 51.
3. In the **Settings** window for Particle tracing for fluid flow, locate the **Particle Properties** section.
4. From **Particle release specification** list, choose **Specify normal mass flow**.
5. From **Wall precision order** list, choose **2**.

Wall I

1. In the **Model Builder** window, under **Component I (comp I)>Particle Tracing for Fluid Flow(fpt)** click **Wall I**.
2. In the **Settings** window for Wall, locate the **Wall condition** section.
3. From the **Wall condition** list, choose **Bounce**.

Particle Properties I

1. In the **Model Builder** window, under **Component I (comp I)>Particle Tracing for Fluid Flow (fpt)** click **Particle Properties I**.
2. In the **Settings** window for Particle Properties, locate the **Particle Properties** section.
3. In the d_p text field, type 1E-6 [m].

Drag Force I

1. On the **Physics** toolbar, click **Domains** and choose **Drag Force**.
2. Select Domains: 1,2,3 and 51.
3. In the **Settings** window for Drag Force, locate the **Drag Force** section.
4. From the **u** list, choose **Velocity field (spf)**.
5. From the **μ** list, choose **Dynamic viscosity (spf/fp1)**.

Gravity Force I

1. On the **Physics** toolbar, click **Domains** and choose **Gravity Force**.
2. Select Domains: 1,2,3 and 51.
3. In the **Settings** window for Gravity Force, locate the **Gravity Force** section.
4. From the **ρ** list, choose **Density (spf/fp1)**.

Particle Counter I

1. On the **Physics** toolbar, click **Domains** and choose **Particle Counter**.
2. Select Domains: 1,2,3 and 51.

3. In the **Settings** window for Particle Counter, locate the **Particle Counter** section.
4. From the **Release feature** list, choose **Release 1**.

Release 1

1. On the **Physics** toolbar, click **Domains** and choose **Release**.
2. Select Domains: 1,2,3 and 51.
3. In the **Settings** window for Release, locate the **Rate of mass flow** section.
4. In the \dot{m} field, type 0.0005867 [mg/s].
5. In the **Settings** window for Release, locate the **Initial position** section.
6. From the **Initial position** list, choose **Density**.
7. In the N field, type 3000.
8. In the ρ field, type 1
9. From the **Release distribution accuracy order** list, choose **5**
10. In the **Settings** window for Release, locate the **Initial velocity** section.
11. From the **Initial velocity** list, choose **Expression**.

STUDY 2

Step 1: Time Dependent

7. In the **Model Builder** window, expand the **Study 2** node, then click **Step I: Time Dependent**.
8. In the **Settings** window for Time Dependent, click to expand the **Values of dependent variables** section.
9. Locate the **Values of Dependent Variables** section. Find the **Values of variables not solved for** subsection. From the **Settings** list, choose **User controlled**.
10. From the **Method** list, choose **Solution**.
11. From the **Study** list, choose **Study I**.
12. Locate the **Study Settings** section. Click **Range**.
13. In the **Range** dialog box, type 0.1 in the **Step** text field.
14. In the **Stop** text field, type 40.
15. Click **Replace**.
16. On the **Home** toolbar, click Compute.

RESULTS

The following steps reproduce Table 1

Data Set

1. On the **Results** toolbar, right click on **Data Set>Particle I** and choose **Duplicate**.
2. Right click on **Particle II** and choose **Add Selection**.
3. In the **Settings** window for Add selection, locate **Geometric entity level** list and choose **Domain**.
4. Select Domains: 1,2,3 and 51.

Derived Values

1. On the **Results** toolbar, click on **Derived values** and choose **Global evaluation**.
2. In the **Settings** window for Global evaluation, locate **Data set** list and choose **Particle 2**.
3. In **Time selection** list, choose **Last**.
4. In the **Settings** window for Global evaluation, locate **Expression** section.
5. In the *Expression* field, type **fpt.alpha**.
6. In the *Unit* field, type **1**.
7. Click **Evaluate** button.

TABLE

Go to the **Table** window.