

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

*Instituto de Técnicas Energéticas de la Universidad Politécnica de
Cataluña, dentro del programa de Doctorado “Ingeniería Nuclear”*

**CONTRIBUCIÓN A LA
CARACTERIZACIÓN DE
AEROSOL RADIATIVOS
DERIVADOS DEL RADÓN**

Autor: Arturo Vargas Drechsler
Director: Xavier Ortega Aramburu

CAPÍTULO IV

SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL TRANSPORTE DE PARTÍCULAS EN TUBOS DE DIFUSIÓN

IV.1 Introducción

Debido a la imposibilidad de verificar experimentalmente las distribuciones de penetración de los tamices metálicos y tubos de difusión para diámetros de partículas inferiores a aproximadamente 1 μm , se hace aconsejable la utilización de tubos de difusión para este rango de diámetros. El motivo se debe a que el sistema de selección de partículas mediante tubos permite establecer las ecuaciones para su modelización que no tienen la complejidad derivada de la geometría propia del entrelazado de los hilos del tamiz, que imposibilita disponer de dichas ecuaciones obligando a recurrir a técnicas semi-empíricas.

Como ya se ha indicado, para llevar a cabo un estudio de simulación del comportamiento de los tubos de difusión así como del análisis de la influencia de los distintos fenómenos y determinar las distribuciones de penetración de forma precisa se requiere resolver las ecuaciones III.13-III.17 mediante análisis numérico.

Se trata por tanto de resolver numéricamente el transporte de partículas en el interior de los tubos de difusión de manera que permita la determinación de las curvas de penetración. En este trabajo se ha utilizado el método SOLA-VOF (Hirt y col. 1975, Nichols y col. 1980) para resolver numéricamente el perfil de velocidades; mientras que la resolución numérica de la ecuación de transporte se ha efectuado mediante técnicas de Monte-Carlo, para lo que se han implementado los correspondientes programas en lenguaje FORTRAN. La aplicación de esta modelización ha permitido llevar a cabo un análisis detallado de la influencia de los distintos fenómenos que afectan a la penetración de las partículas en el tubo: formación y desaparición de especies, difusión axial y fenómenos aerodinámicos. También, se ha analizado las consecuencias, en la eficiencia de detección, de una deposición superficial heterogénea en el filtro de salida del tubo de difusión. Para ello se ha realizado un programa en FORTRAN que, mediante la técnica de Monte-Carlo, permite el cálculo de estas eficiencias de detección. En la figura IV.1 se muestra un esquema de un tubo de difusión con su perfil de velocidades y el transporte de una partícula por convección y difusión.

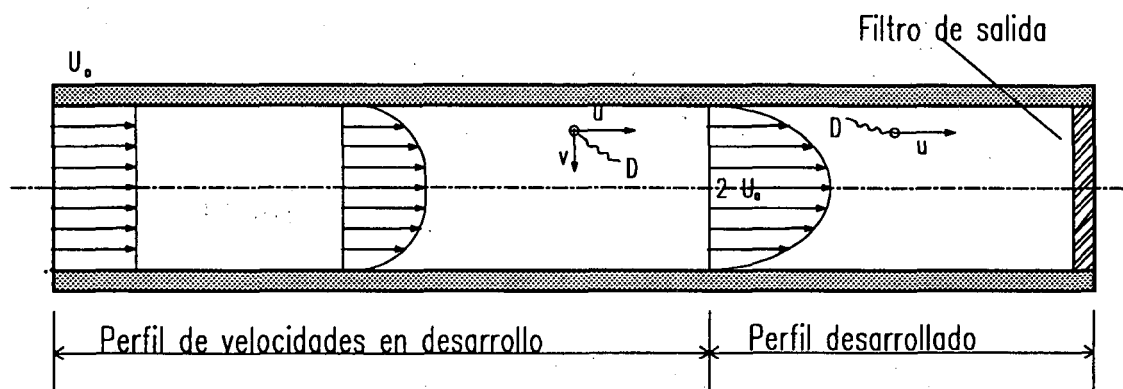


Fig. IV.1. Esquema de un tubo de difusión donde se muestra el desarrollo del perfil de velocidades, así como el transporte de una partícula por su interior debido a la convección (u, v) y a la difusión (D).

IV.2 El código SOLA-VOF para la solución numérica del campo de velocidades

La técnica numérica SOLA-VOF (Volume-of-Fluid) utilizada para la solución del perfil de velocidades de un fluido incompresible, supone densidad constante y circulación por el interior de un tubo en régimen laminar. La técnica SOLA-VOF o, el método de iteración presión-velocidad, es una variante simplificada de los métodos MAC (Marker-And-Cell) (Welch y col. 1966, Amsden y Harlow 1970, Nichols y col. 1980). En el caso de SOLA-VOF, la principal diferencia con respecto al resto de algoritmos consiste en el proceso de resolver el campo de presiones, al no requerirse de condiciones de contorno para el mismo. Una rigurosa descripción de estos métodos numéricos se puede encontrar en la tesis doctoral de Lemos 1990. De forma genérica en la estructura del algoritmo se contemplan los siguientes elementos:

1. La velocidad se calcula explícitamente utilizando las ecuaciones del momento en la dirección axial (z) y radial (r), y se determina el gradiente de presión para el paso de los intervalos de tiempo n . Estas velocidades estimadas tienen la correcta vorticidad pero en general no satisfacen la ecuación de continuidad.
2. La presión y la velocidad son iteradas simultáneamente en cada celda del mallado de manera que se cumpla la ecuación de continuidad hasta un cierto nivel de tolerancia.

Antes de llevar a cabo la discretización de las ecuaciones por diferencias finitas, se debe realizar una serie de consideraciones en el mallado. En la solución del perfil de velocidades es conveniente utilizar un mallado desplazado de manera que el gradiente de presión calculado sea directamente el causante del cambio de velocidad. Esto es así por una cuestión de estabilidad de la solución (Patankar 1980). En la figura IV.2 se muestra un nodo de la malla con la numeración utilizada en el programa FORTRAN desarrollado en este trabajo.

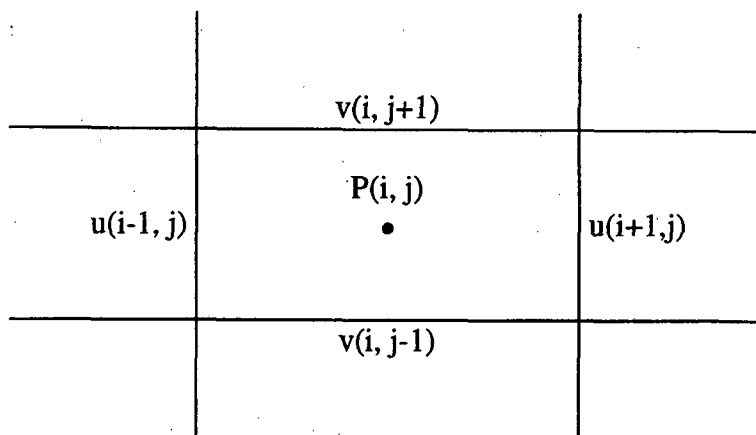


Fig. IV.2. Representación de un nodo de la malla utilizada para la solución numérica del perfil de velocidades por la técnica SOLA-VOF implementada en este trabajo.

La discretización del dominio de cálculo se representa en la figura IV.3. Como se puede observar este dominio se encuentra rodeado por un cinturón de celdas virtuales que se utilizan para el establecimiento de las condiciones de contorno.

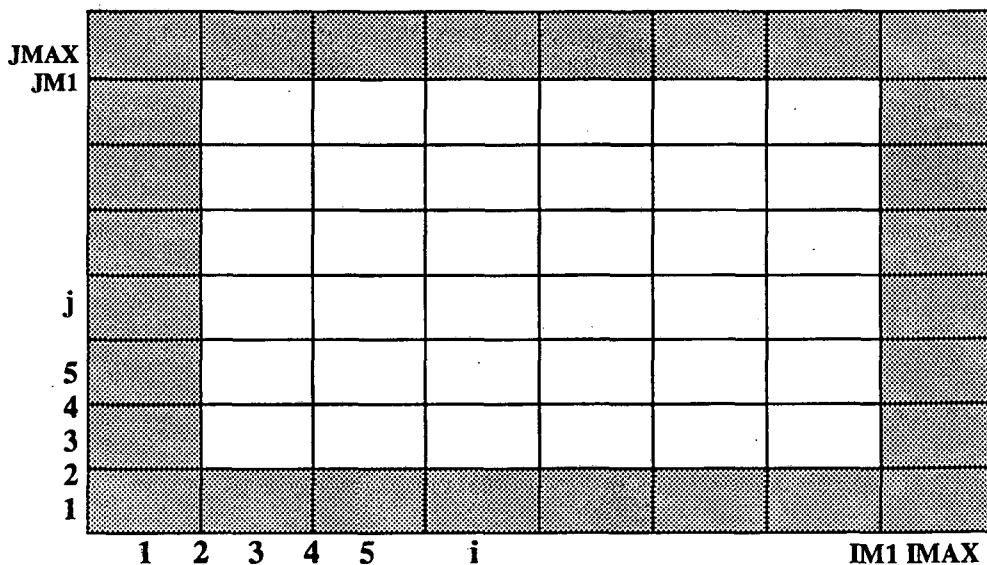


Fig. IV.3. Discretización del dominio donde se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes numéricamente por el método SOLA-VOF.

Las condiciones de contorno propuestas para resolver las ecuaciones son:

- a) Velocidad axial a la entrada del tubo de valor U_M .

$$u(2, j) = U_M \quad \text{para } j = 1, JMAX \text{ sólo impares} \quad (IV.1)$$

b) Velocidad radial a la entrada del tubo igual a cero.

$$v(1, j) = -v(3, j) \quad \text{para } j = 2, JMAX+1 \text{ sólo pares} \quad (IV.2)$$

c) Velocidad axial en la pared del tubo igual a cero.

$$u(i, JMAX) = -u(i, JM1-1) \quad \text{para } i = 2, IMAX+1 \text{ sólo pares} \quad (IV.3)$$

d) Velocidad radial en la pared del tubo igual a cero

$$v(i, JM1) = 0 \quad \text{para } i = 1, IMAX \text{ sólo impares} \quad (IV.4)$$

Las condiciones e) y f) hacen referencia a la condición de simetría en el centro del tubo ($j = 2$):

e) La variación de la velocidad axial respecto al eje radial es cero.

$$u(i, 1) = u(i, 3) \quad \text{para } i = 2, IMAX+1 \text{ sólo pares} \quad (IV.5)$$

f) La velocidad radial en el centro del tubo es igual a cero.

$$v(i, 2) = 0 \quad \text{para } i = 2, IMAX+1 \text{ sólo pares} \quad (IV.6)$$

En la salida del tubo (pared derecha de la figura IV.3) se han introducido dos condiciones de contorno que permitirán evaluar la eventual perturbación provocada por el filtro situado en esta posición. Una primera condición consiste en suponer que la velocidad axial a la salida del tubo es constante de manera que está provocando la máxima perturbación. Esta condición ya fue establecida por Sasse y col. 1994 y Malet 1997.

g1) La velocidad axial a la salida del tubo es igual a U_M .

$$u(IM1, j) = U_M \quad \text{para } j = 1, JMAX \text{ sólo impares} \quad (IV.7)$$

h1) La velocidad radial a la salida es igual a cero.

$$v(IMAX, j) = -v(IM1-1, j) \quad \text{para } j = 2, JMAX+1 \text{ sólo pares} \quad (IV.8)$$

La segunda condición de contorno que se ha utilizado para la salida del tubo consiste en suponer que el filtro no produce ningún tipo de perturbación en el perfil de velocidades. En este caso las condiciones de contorno sólo se deben aplicar en la estimación de las velocidades pero no en las iteraciones que hacen que se cumpla la ecuación de continuidad.

g2) La variación de la velocidad axial respecto al eje axial es cero.

$$u(IM1, j) = u(IM1-2, j) \quad \text{para } j = 1, JMAX \text{ sólo impares} \quad (IV.9)$$

h2) La variación de la velocidad radial respecto al eje axial es cero.

$$v(\text{IMAX}, j) = v(\text{IM1}-1, j) \quad \text{para } j = 2, \text{JMAX}+1 \text{ sólo pares} \quad (\text{IV.10})$$

La aproximación por diferencias finitas de las ecuaciones del momento mediante un esquema "up-wind" y de forma explícita, utilizando la nomenclatura implementada en el algoritmo desarrollado en este trabajo, es:

$$u^+(i+1, j) = u(i+1, j) + \Delta t \left[-\frac{P(i+2, j) - P(i, j)}{\Delta z} - FUX - FUY + VISX \right] \quad (\text{IV.11})$$

$$v^+(i, j+1) = v(i, j+1) + \Delta t \left[-\frac{P(i, j+2) - P(i, j)}{\Delta r} - FVX - FVY + VISY \right] \quad (\text{IV.12})$$

donde:

u^+ , v^+ son las velocidades estimadas en el tiempo $t+\Delta t$.

Δz es la longitud axial de las celdas.

Δr es la longitud radial de las celdas.

Las aproximaciones numéricas de la ecuación IV.11 son:

$$FUX = \frac{u(i+1, j)}{2 \Delta z} \{ (u(i+3, j) - u(i-1, j)) + |u(i+1, j)| \\ (2u(i+1, j) - u(i-1, j) - u(i+3, j)) \} \quad (\text{IV.13})$$

$$FUY = \frac{v(i+1, j)}{2 \Delta r} \{ (u(i+1, j+2) - u(i+1, j-2)) + |v(i+1, j)| \\ (2u(i+1, j) - u(i+1, j-2) - u(i+1, j+2)) \} \quad (\text{IV.14})$$

$$VISX = \frac{v}{\Delta z^2} [u(i+3, j) - 2u(i+1, j) + u(i-1, j)] + \\ + \frac{v}{\Delta z^2} [u(i+3, j) - 2u(i+1, j) + u(i-1, j)] + \\ + \frac{v}{2 \Delta r r} [u(i+1, j+2) - u(i+1, j-2)] \quad (\text{IV.15})$$

donde r es la posición del borde inferior de la celda:

$$r = (j-2) \frac{\Delta r}{2} \quad (\text{IV.16})$$

Las aproximaciones numéricas de la ecuación IV.12 son:

$$FVX = \frac{u(i, j+1)}{2\Delta z} \{ (v(i+2, j+1) - v(i-2, j+1)) + |u(i, j+1)| (2v(i, j+1) - v(i-2, j+1) - v(i+2, j+1)) \} \quad (IV.17)$$

$$FVY = \frac{v(i, j+1)}{2\Delta r} \{ (v(i, j+3) - v(i, j-1)) + |v(i, j+1)| (2v(i, j+1) - v(i, j-1) - v(i, j+3)) \} \quad (IV.18)$$

$$VISY = \frac{v}{\Delta z^2} [v(i+2, j+1) - 2v(i, j+1) + v(i-2, j+1)] + \frac{v}{\Delta r^2} [v(i, j+3) - 2v(i, j+1) + v(i, j-1)] + v \left[\frac{v(i, j+3) - v(i, j-1)}{2\Delta r r_1} - \frac{v(i, j+1)}{r_1^2} \right] \quad (IV.19)$$

donde r_1 es la posición del borde superior de la celda:

$$r_1 = (j-1) \frac{\Delta r}{2} \quad (IV.20)$$

En general, los valores de u^+ y v^+ obtenidos de las ecuaciones IV.11 y IV.12 no satisfacen la ecuación de continuidad puesto que no permiten obtener el valor de la presión. Para poder satisfacer la ecuación de continuidad y determinar la presión correcta, se deben ajustar las presiones y las velocidades en cada celda ocupada por el fluido (VOF - volume of fluid). En cada una de estas celdas la presión se modifica de tal manera que la divergencia, $D(i, j)$, tienda a cero. La divergencia es el valor que se obtiene de sustituir los valores de velocidad en la ecuación de continuidad que, como ya se ha indicado, en general no será igual a cero.

El proceso seguido para conseguir que la divergencia tienda a cero, consiste en un sistema iterativo de corrección de la presión mediante un cierto incremento de su valor de tal manera que:

$$P^{n+1}(i, j) = P^n(i, j) + \Delta P^n(i, j) \quad (IV.21)$$

y las velocidades se incrementan despejando las ecuaciones de Navier-Stokes considerando que sólo varía el término de presión:

$$u^{n+1}(i+1, j) = u^n(i+1, j) + \Delta P^n(i, j) \frac{\Delta t}{\Delta z} \quad (\text{IV.22})$$

$$u^{n+1}(i-1, j) = u^n(i-1, j) - \Delta P^n(i, j) \frac{\Delta t}{\Delta z} \quad (\text{IV.23})$$

$$v^{n+1}(i, j+1) = v^n(i, j+1) + \Delta P^n(i, j) \frac{\Delta t}{\Delta r} \quad (\text{IV.24})$$

$$v^{n+1}(i, j-1) = v^n(i, j-1) - \Delta P^n(i, j) \frac{\Delta t}{\Delta r} \quad (\text{IV.25})$$

Los supraíndices n y $^{n+1}$ indican los pasos de iteración en los que se está efectuando la corrección de presión y velocidades. El valor de $\Delta P^n(i, j)$ utilizado en la correspondiente iteración es el que se obtiene de sustituir las cuatro expresiones anteriores (IV.22, IV.23, IV.24 y IV.25) en la ecuación de continuidad III.14:

$$\Delta P^n(i, j) = D^n(i, j) \frac{\beta}{\Delta t \left(\frac{1}{\Delta z^2} + \frac{1}{\Delta r^2} \right)} \quad (\text{IV.26})$$

donde:

β es el coeficiente de sobrerrelajación para acelerar la solución y cuyo valor está comprendido entre 1 y 2, y $D^n(i, j)$ se obtiene con la siguiente expresión:

$$D^n(i, j) = \frac{u^n(i+1, j) - u^n(i-1, j)}{\Delta z} + \frac{v^n(i, j+1) - v^n(i, j-1)}{\Delta r} + \frac{v^n(i, j+1) + v^n(i, j-1)}{r + r_1} \quad (\text{IV.27})$$

Este proceso iterativo se lleva a cabo hasta que el valor de la divergencia es menor a una cierta cantidad o hasta que se alcance un número de iteraciones máximo.

El algoritmo de cálculo descrito se ha implementado en un programa en FORTRAN. De manera a validar este programa se ha resuelto el perfil de velocidades que Malet 1997 obtuvo mediante la técnica de elementos finitos. Malet 1997 utilizó el programa numérico TRIOEFF desarrollado por el CEA para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes. Así, la verificación del programa se ha llevado a cabo para un tubo liso cilíndrico de 4 cm de radio, $Re = 500$ y $v(\text{aire}) = 0.144 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. Los parámetros utilizados en el programa desarrollado en este trabajo son una precisión en la divergencia que alcanza el valor de 0.001, utiliza un número máximo de iteraciones de 100 y un coeficiente de sobrerrelajación de 1.7. Los resultados obtenidos comparados con los de Malet se presentan para la velocidad axial (u) y radial (v) en las figuras IV.4 y IV.5 respectivamente. En estas figuras se aprecia como la diferencia de velocidades axial y radial no es significativa y por tanto se considera el programa de cálculo desarrollado suficientemente contrastado. Un comentario que debe realizarse relativo a la velocidad radial es que en los resultados obtenidos por Malet se aprecia una ligera velocidad en el centro del tubo, siendo esto físicamente imposible debido a la simetría del tubo de manera que en su eje la velocidad radial es igual a cero.

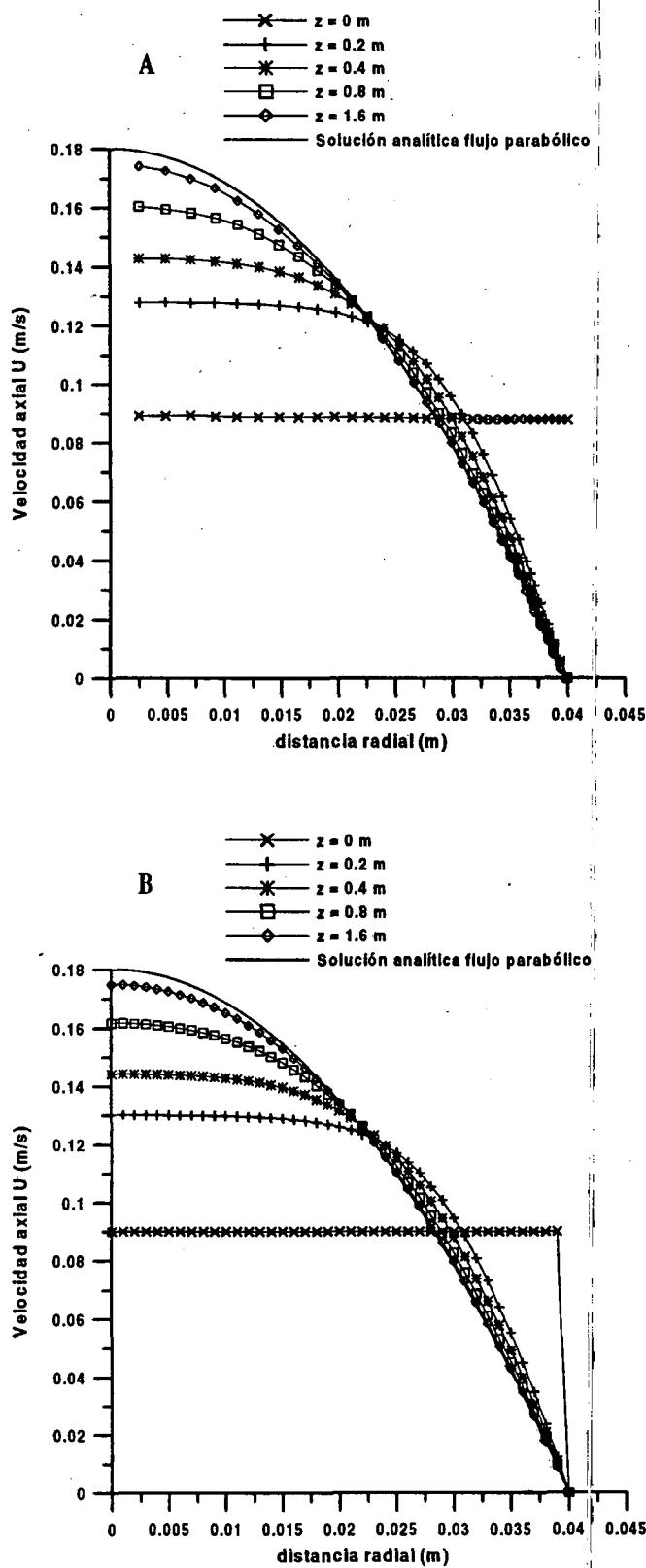


Fig. IV.4. Comparación entre el perfil de velocidad axial obtenido mediante elementos finitos (A) (Malet 1997) y el código SOLA-VOF desarrollado en este trabajo (B). Radio del tubo = 4 cm y $Re = 500$.

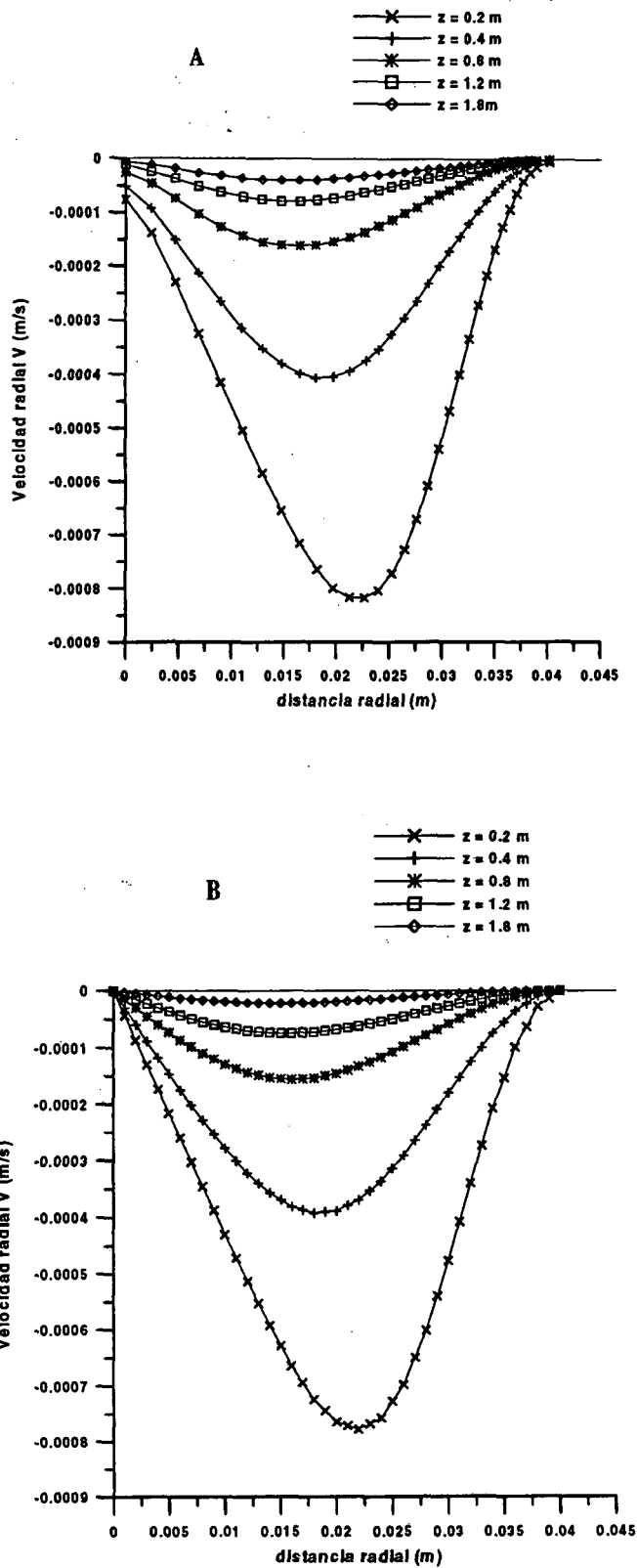


Fig. IV.5. Comparación entre el perfil de velocidad radial obtenido mediante elementos finitos (A) (Malet 1997) y el código SOLA-VOF desarrollado en este trabajo (B). Radio del tubo = 4 cm y $Re = 500$.

IV.3 Solución numérica de la ecuación de transporte de partículas mediante técnicas de Monte-Carlo

Conocido el campo de velocidades se trata de simular el movimiento de las partículas en el interior del tubo para determinar si son capaces de alcanzar la salida del mismo y calcular así la distribución de la penetración, P . Para ello, en algunos trabajos, se han utilizado el método de diferencias finitas en la resolución de la ecuación III.13 (Sasse y col. 1994), así como la técnica de elementos finitos (Malet y col. 1995). Sin embargo, el elemento más débil de estos métodos, se refiere a la conocida existencia del efecto de difusión falsa (Patankar 1980).

En el presente trabajo se ha desarrollado un programa de cálculo en FORTRAN basado en la técnica de Monte-Carlo. Esta técnica no presenta los problemas mencionados y además, permite llevar a cabo el estudio de la influencia de los distintos parámetros de forma simple e intuitiva puesto que esta técnica de simulación refleja el movimiento de la partícula. Una gran ventaja de este método estriba en que permite conocer la ubicación de la partícula en cada instante de tiempo de manera que facilita el cálculo de la deposición heterogénea en el filtro de salida tal como se analizará en el apartado IV.4.4.

Para desarrollar el programa de cálculo se deben sortear el recorrido de la partícula motivado por el fenómeno de la difusión y su sentido de desplazamiento en cada paso de tiempo, así como la posición de la partícula en el origen del tubo. Como introducción a la solución completa y para verificar su correcto funcionamiento, se inicia el análisis suponiendo que el proceso de difusión se efectúa en una sola dimensión. Si se libera una partícula en la posición $x=0$, la probabilidad por unidad de longitud de encontrarla a una distancia x sigue una distribución Normal según la siguiente expresión (Hinds, 1982):

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (\text{IV.28})$$

donde $\sigma = (2 D t)^{0.5}$ se denomina longitud de difusión (D es el coeficiente de difusión y t es el tiempo transcurrido desde su liberación en $x=0$).

La simulación del proceso de difusión por técnicas de Monte-Carlo, según la distribución anterior, se lleva a cabo mediante el sorteo de la longitud recorrida debida al proceso de difusión con la siguiente expresión:

$$l_D = (2\xi - 1)\sqrt{6 D \Delta t} \quad (\text{IV.29})$$

donde Δt es el paso de tiempo, el coeficiente 6 que aparece en la expresión se obtiene del sorteo Gaussiano de difusión, y ξ es un número aleatorio comprendido entre (0,1) de manera a considerar los dos sentidos.

La expresión analítica IV.28 se compara con la siguiente obtenida de forma numérica después de sortear un cierto número de partículas en un tiempo t :

$$P^*(x_i) = \frac{N_i}{N \Delta x_i} \quad (IV.30)$$

donde $P^*(x_i)$ es la probabilidad por unidad de longitud recorrida de encontrar una partícula entre x_i y $x_i + \Delta x_i$, N_i es el número de partículas que se encuentran entre x_i y $x_i + \Delta x_i$ y N es el número total de partículas simuladas. En la fig. IV.6 se muestra la comparación entre la ecuación IV.28 y el resultado de la expresión IV.30. La conclusión de este ejercicio introductorio es la verificación de la validez del programa desarrollado. Los pasos siguientes a seguir son: en primer lugar, la implementación del modelo en dos dimensiones y, luego, extenderlo a los tubos de difusión y contrastarlo con las soluciones analíticas disponibles.

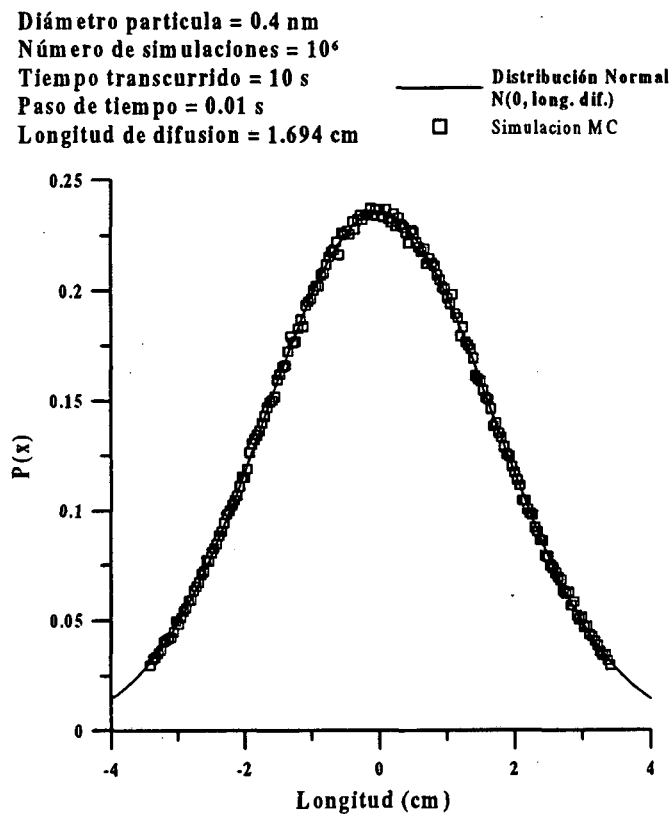


Fig. IV.6. Comparación entre la solución analítica y la simulación numérica por técnica de Monte-Carlo de la difusión en una dimensión.

En dos dimensiones la probabilidad por unidad de superficie de encontrar una partícula en la posición (x, y) se determina multiplicando dos gaussianas para cada dimensión, por ser funciones de probabilidad independientes:

$$P(x, y) = \frac{1}{2\pi \sigma^2} e^{-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}} \quad (IV.31)$$

Con la finalidad de optimizar el código de simulación por Monte-Carlo es preferible trabajar en coordenadas polares, de forma que la expresión anterior sólo dependerá de la distancia r al centro debido a la simetría azimutal:

$$P(r) = \frac{r}{\sigma^2} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} \quad (IV.32)$$

Para determinar la longitud recorrida por una partícula y su sentido en su movimiento por difusión se deben sortear dos números aleatorios. Las longitudes en las dos dimensiones se obtienen con las siguientes expresiones:

$$l_{D_x} = (2\xi_1 - 1)\sqrt{6D\Delta t} \quad (IV.33a)$$

$$l_{D_y} = (2\xi_2 - 1)\sqrt{6D\Delta t} \quad (IV.33b)$$

El cálculo de la expresión (IV.32) mediante la simulación por Monte-Carlo se obtiene con su correspondiente expresión análoga, $P^*(r)$:

$$P^*(r_i) = \frac{N_i}{N \Delta r_i} \quad (IV.34)$$

En la figura IV.7 se observa que el programa de cálculo desarrollado para la simulación por Monte-Carlo del mecanismo de difusión obtenida con la expresión IV.34 se ajusta perfectamente a la solución analítica de la expresión IV.32.

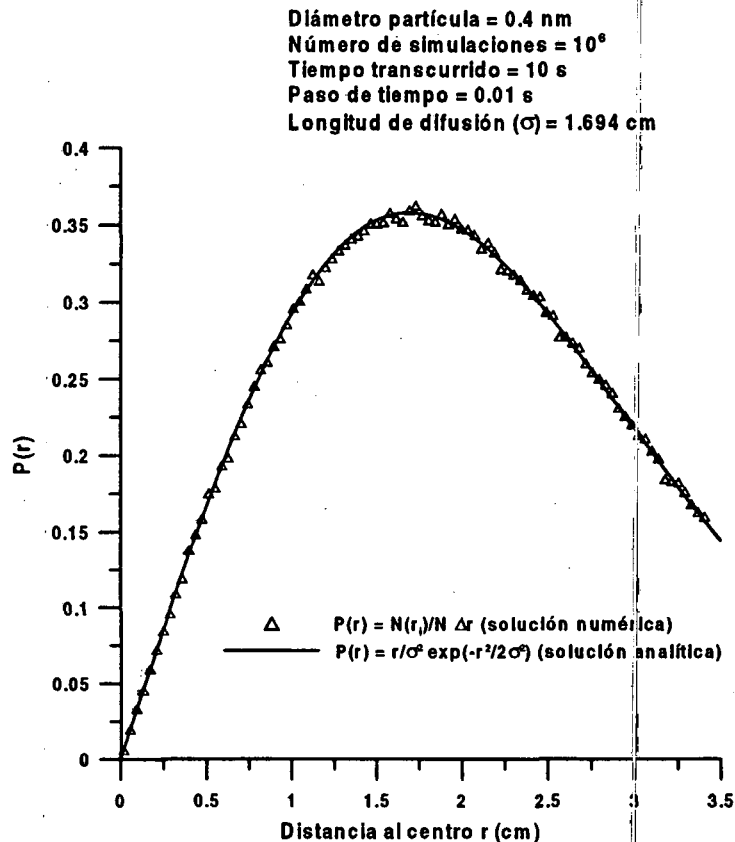


Figura IV.7. Comparación entre la solución analítica y la simulación numérica por técnica de Monte-Carlo de la difusión de una partícula de 0.4 nm, en un tiempo de 10 s con un paso de tiempo de 0.01 s y 10^6 simulaciones, para dos dimensiones.

Finalmente, para completar el programa de simulación por Monte-Carlo se estimarán las penetraciones para diferentes tamaños de partículas, en el caso de un perfil de velocidades plana y parabólica y se compararán con las soluciones analíticas (ecuaciones III.18 y III.20). Asimismo se llevará a cabo un estudio de la incidencia del valor del paso de la variable tiempo.

Antes de presentar los resultados obtenidos con estos perfiles de velocidades se indica a continuación la manera de sortear la posición inicial de la partícula en la entrada del tubo de difusión. El sorteo de la posición inicial se debe realizar según el número de partículas por unidad de tiempo que entren en el tubo, ϕ , es decir:

$$\phi(\text{part./s}) = C_0(\text{part./cm}^3)U(\text{cm/s})S(\text{cm}^2) \quad (\text{IV.35})$$

Como la concentración en el exterior del tubo, C_0 , y la sección del tubo, S , son constantes, el flujo de partículas en la entrada depende del perfil de velocidad en ésta.

Así, si el perfil de velocidades es plano, el sorteo de la posición debe realizarse de manera que la concentración superficial de partículas en la entrada del tubo sea constante. Por tanto, el sorteo del radio, r , y del ángulo ω se obtienen según las siguientes expresiones:

$$r = R\sqrt{\xi_1} \quad (\text{IV.36a})$$

$$\omega = 2\pi\xi_2 \quad (\text{IV.36b})$$

Si el perfil de velocidades es parabólico se describe según la siguiente expresión:

$$U(r) = U_M r \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \quad (\text{IV.37})$$

el sorteo debe realizarse según la función de densidad de probabilidad siguiente:

$$R(r) = K \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \quad (\text{IV.38})$$

donde K es una constante que se obtiene al normalizar a 1 la función de probabilidad:

$$1 = \int_0^R K \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) dr \quad (\text{IV.39})$$

de manera que $K=4/R^2$.

Por tanto el número aleatorio, ξ , se obtiene de la siguiente ecuación integral:

$$\xi = \int_0^r R(r) dr \quad (\text{IV.40})$$

calculando r de la ecuación anterior se obtiene la posición inicial de la partícula:

$$r = R\sqrt{1 - \sqrt{\xi}} \quad (IV.41)$$

La verificación del correcto funcionamiento del programa de cálculo desarrollado, para distintos valores de Δ ($\Delta = \pi DL / (4Q)$) y de Δt , se presenta en las tablas IV.1 y IV.2 para perfil de velocidades plano y parabólico respectivamente.

Δ	Solución analítica P (III.20)	Solución Monte-Carlo P para Δt (s)			
		0.1	0.01	0.001	0.0001
0.025200	0.3927	0.4972	0.4368	0.4090	0.3962
0.013800	0.5297	0.6110	0.5591	0.5374	0.5346
0.007900	0.6361	0.7020	0.6599	0.6407	0.6364
0.004568	0.7217	0.7719	0.7377	0.7184	0.7140
0.002521	0.7940	0.8266	0.8036	0.7867	0.7845
0.001272	0.8542	0.8743	0.8562	0.8492	0.8461
0.000600	0.8994	0.9158	0.8994	0.8935	0.8941
0.000277	0.9308	0.9418	0.9337	0.9277	0.9279
0.000128	0.9522	0.9608	0.9527	0.9526	0.9495

Tabla IV.1. Comparación entre la solución analítica de la penetración en tubos para perfil de velocidades plano y la simulación numérica por Monte-Carlo para distintos valores del paso de tiempo. 10000 simulaciones para cada tamaño de partícula representado por el parámetro $\Delta = \pi DL / (4Q)$.

Δ	Solución analítica P (III.18)	Solución Monte-Carlo P para Δt (s)			
		0.1	0.01	0.001	0.001
0.025200	0.5768	0.6345	0.6030	0.5846	0.5748
0.013800	0.6992	0.7436	0.7163	0.7020	0.7010
0.007900	0.7836	0.8110	0.7975	0.7910	0.7876
0.004568	0.8440	0.8648	0.8533	0.8500	0.8469
0.002521	0.8905	0.9069	0.8996	0.8946	0.8938
0.001272	0.9270	0.9404	0.9368	0.9293	0.9319
0.000600	0.9534	0.9646	0.9597	0.9568	0.9570
0.000277	0.9712	0.9779	0.9735	0.9752	0.9744
0.000128	0.9825	0.9868	0.9838	0.9850	0.9842

Tabla IV.2. Comparación entre la solución analítica de la penetración en tubos para perfil de velocidades parabólico y la simulación numérica por Monte-Carlo para distintos valores del paso de tiempo. 10000 simulaciones para cada tamaño.

Tanto para el perfil plano de velocidades como para el perfil parabólico, el error relativo que se comete al incrementar el valor del paso de tiempo es más significativo para valores altos de Δ , es decir, para coeficientes de difusión elevados o partículas de diámetro pequeño. En la figura IV.8 se presenta el error relativo que se comete para los distintos valores del paso de tiempo y distintos valores de Δ , donde se muestra el hecho anterior. Asimismo se desprende que en la elección del valor óptimo del paso de tiempo se debe llegar a un compromiso entre el tiempo de cómputo y la precisión a alcanzar. Por estas razones se ha escogido un valor de 0.001 s.

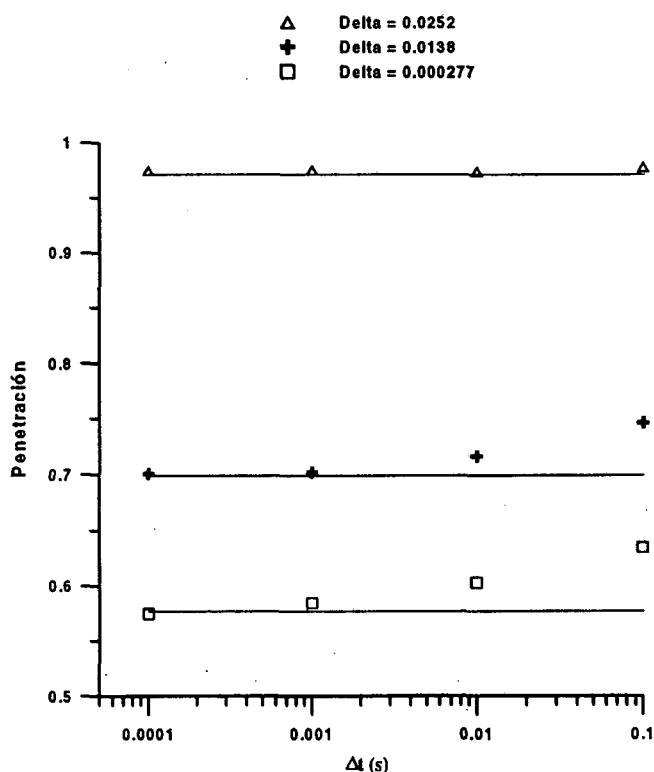


Fig. IV.8. Valores de penetración obtenidos mediante simulación de Monte-Carlo para distintos pasos de tiempo y valores de Δ para un perfil de velocidades de tipo parabólico. En línea continua se presenta el valor de penetración para perfil parabólico de velocidades obtenido con la expresión III.18.

IV.4 Análisis de sensibilidad de la distribución de penetraciones

En este apartado se analiza la influencia de los distintos procesos físicos que rigen el transporte de las partículas por el interior de tubos cilíndricos. Los distintos procesos a analizar son: los fenómenos de formación y desaparición de especies radiactivas, la difusión axial, los fenómenos aerodinámicos y la deposición heterogénea en el filtro.

IV.4.1 Influencia de los fenómenos de formación y desaparición de especies radiactivas

En la ecuación de balance III.13 el término de desaparición de especies viene representado por la tasa de desintegración, λC , mientras que el de formación por el término q . En los tubos de difusión, el término de desaparición consiste en las

desintegraciones del radisótopo, en este caso ^{218}Po , en el interior del tubo. El término de formación se determina a partir de las desintegraciones del precursor de aquel radisótopo, en este caso radón, en el interior del tubo.

La probabilidad de que un radisótopo se desintegre en el intervalo de tiempo Δt viene determinada por la siguiente expresión:

$$P(t) = 1 - e^{-\lambda \Delta t} \approx \lambda \Delta t \quad (\text{IV.42})$$

La segunda igualdad de la expresión anterior se cumple cuando el producto es pequeño. Con el paso de tiempo seleccionado y los periodos de semidesintegración del ^{218}Po y radón este producto es mucho menor a la unidad, y por tanto, para determinar si en cada paso de tiempo de la simulación se desintegra el radisótopo se sortea un número aleatorio ξ que si es menor que el producto $\lambda \Delta t$ entonces se considera que se produce una desintegración.

A continuación se analizan con mayor detalle los fenómenos de desintegración radiactiva y de formación en tubos de difusión.

IV.4.1.1 Desintegración radiactiva

En la tabla IV.3 se comparan los resultados obtenidos en la simulación por Monte-Carlo de la distribución de penetración de partículas para un perfil de velocidades plano y teniendo en cuenta la posibilidad de desintegración radiactiva. En la tabla también se presentan los resultados obtenidos con la expresión analítica III.20 para distintos valores de Δ y con un paso de tiempo de 0.001 s. Se desprende de la tabla IV.3 que la disminución de la penetración de partículas, teniendo en cuenta el fenómeno de la desintegración radiactiva, no es significativa para el diseño del sistema de medida desarrollado en el capítulo V.

Δ	Solución analítica P (ecuación III.20)	Solución Monte-Carlo P	
		Sin desint.	Con desint.
0.2462	0.0023	0.0030	0.0030
0.1064	0.0590	0.0654	0.0611
0.0496	0.220	0.226	0.221
0.0242	0.403	0.408	0.404
0.0110	0.576	0.579	0.571
0.00431	0.730	0.723	0.720
0.00157	0.838	0.832	0.821
0.00057	0.902	0.895	0.889
0.00021	0.940	0.938	0.933

Tabla IV.3. Influencia en el parámetro de penetración de la desintegración de ^{218}Po en el interior de un tubo mediante técnicas de Monte-Carlo para distintos valores de Δ que corresponden a un tubo de 50 cm de longitud, velocidad a la entrada de 22.3 cm s^{-1} y partículas con diámetros comprendidos entre 0.2 nm y 0.12 nm.

En el capítulo V se justifica en el diseño de los tubos de difusión las dimensiones de los tubos seleccionados que corresponden a longitudes de 10 cm, 30 cm y 50 cm, y un radio de 1 cm. El caudal de paso es del orden de $70 \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, de manera que se obtienen tiempos medios de residencia en el interior del tubo de 0.45 s, 1.35 s y 2.24 s respectivamente. Estos tiempos son pequeños comparados con los periodos de semidesintegración de los descendientes del radón de vida corta (3.11 min para el ^{218}Po , 26.8 min para el ^{214}Pb y 19.9 min para el ^{214}Bi) y por tanto el término de tasa de formación puede despreciarse en la ecuación de transporte para tubos de difusión de estas características.

IV.4.1.2 Formación de especies en tránsito

Las experiencias en las que el objetivo es determinar el espectro dimensional de descendientes del radón en estado libre, es conveniente llevarlas a cabo en cámaras de radón donde además de controlar la concentración de radón, C_0 , se puede controlar el número de partículas de aerosol. En estas experiencias la cámara de radón se limpia completamente de partículas de aerosol de manera que los descendientes del radón se encuentran prácticamente en su totalidad en estado libre. En estas condiciones ambientales se produce un gran desequilibrio entre las concentraciones de los descendientes y la concentración de radón debido a que la elevada movilidad de aquellos provoca que tengan una alta probabilidad de depositarse por difusión en paredes y suelo de la cámara. Se trata, por tanto, de analizar la contribución en la actividad de ^{218}Po en el filtro de salida como consecuencia de las desintegraciones de los radisótopos de ^{222}Rn en tránsito por el interior del tubo de difusión.

Se disponen de soluciones analíticas al problema considerando que la concentración de radón es homogénea en todo el tubo de difusión. Esta hipótesis es correcta debida a que el periodo de semidesintegración del radón es del orden de 3.82 días mientras que su tiempo de residencia en el interior del tubo es de algunos segundos. Suponiendo una concentración de descendientes nula en la entrada del tubo y para perfil de velocidades parabólico, una expresión analítica muy utilizada para obtener la estimación de la penetración en tránsito es la obtenida por Ingham 1975b:

$$P_{\text{tránsito}} = 1 - 1.258 (2\Delta)^{1/3} + 0.1840 (2\Delta)^{2/3} \quad (\text{IV.43})$$

En el presente trabajo se ha determinado el valor de $P_{\text{tránsito}}$ mediante la técnica de Monte-Carlo que permite obtener una solución más completa al problema. Para ello se sortea la posición inicial del ^{218}Po con igualdad de probabilidad en todo el interior del tubo y se determinan las partículas que alcanzan el filtro de salida siguiendo el mismo proceso de simulación que en el apartado IV.3. La posición inicial del ^{218}Po en el interior del tubo se lleva a cabo mediante la realización de dos sorteos, uno para la longitud axial y el otro para la radial:

$$z = L\xi_1 \quad (\text{IV.44a})$$

$$r = R\sqrt{\xi_2} \quad (\text{IV.44b})$$

En la tabla IV.4 se comparan los valores de $P_{\text{tránsito}}$ obtenidos con la expresión analítica y con la simulación por Monte-Carlo, y los obtenidos considerando un tubo de difusión. Los valores de Δ se han calculado de manera que corresponden a un tubo de 50 cm de longitud, 1 cm de radio, una velocidad de entrada de 22.3 cm s^{-1} y a diámetros de partículas comprendidos entre 0.2 nm y 20 nm.

Δ	Solución analítica		Solución Monte-Carlo	
	P (III.18)	$P_{\text{tránsito}}$ (III.36)	P	$P_{\text{tránsito}}$
0.2462	0.0223	0.1210	0.0232	0.1719
0.1064	0.1727	0.3142	0.1784	0.3010
0.0496	0.3967	0.4569	0.4007	0.4528
0.0242	0.5866	0.5660	0.5823	0.5693
0.0110	0.7369	0.6620	0.7291	0.6605
0.00431	0.8494	0.7497	0.8428	0.7423
0.00157	0.9173	0.8197	0.9186	0.8179
0.00057	0.9550	0.8706	0.9508	0.8691
0.00021	0.9761	0.9072	0.9713	0.9036
0.000076	0,9876	0.9333	0.9820	0.9285

Tabla VI.4. Influencia en el factor de penetración de la formación de ^{218}Po en vuelo en el interior de un tubo de 50 cm mediante técnicas de Monte-Carlo.

De la tabla IV.4 se verifica que la solución obtenida por Monte-Carlo es correcta. De esta manera se podrá aplicar cuando el perfil de velocidades del aire se considere en desarrollo.

Para disponer de órdenes de magnitud de la importancia de este fenómeno se calcula la tasa de átomos de ^{218}Po que alcanzan el filtro como consecuencia de la desintegración del radón en el interior del tubo, $\Phi_{\text{tránsito}}$, mediante la siguiente expresión:

$$\Phi_{\text{tránsito}} = C_0 \pi R^2 L P_{\text{tránsito}} \quad (\text{IV.45})$$

y se compara con la tasa de átomos de ^{218}Po que llegan al filtro directamente, Φ_{Po} , que se obtiene con la siguiente expresión:

$$\Phi_{\text{Po}} = \frac{C_{\text{Po-218}} Q}{\lambda_{218}} P \quad (\text{IV.46})$$

donde Q es el caudal y P es el valor de la penetración calculado según las expresiones analíticas III.18 y III.20 o determinadas mediante la solución obtenida por Monte-Carlo tal como se recoge en el apartado IV.3 para el caso de considerar el perfil de velocidades en desarrollo.

Para mostrar la importancia de este fenómeno se han determinado algunos valores concretos, en los que se ha considerado: tamaño del *cluster* de ^{218}Po formado en el interior del tubo de 0.9 nm de diámetro (coeficiente de difusión de $0.045 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$), longitudes de tubo de 10 cm, 30 cm y 50 cm, radio del tubo de 1 cm y caudal de paso de $74 \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Para estos valores, y considerando el perfil de velocidades de tipo parabólico de manera a disponer de soluciones analíticas y, por tanto, aplicando las ecuaciones III.18, IV.43, IV.45 y IV.46 se obtienen los valores de la tabla IV.5.

L (cm)	Δ	P	Φ_{Po}/ C_{Po-218}	$P_{tr\acute{a}nsito}$	$\Phi_{tr\acute{a}nsito}/ C_{Rn}$	$R = \Phi_{tr\acute{a}nsito}/$ $(\Phi_{Po} + \Phi_{tr\acute{a}nsito})$
10	0.00505	0.8345	$1.573 \cdot 10^{-2}$	0.7366	$2.313 \cdot 10^{-5}$	$1.470 \cdot 10^{-3}$ (C_{Rn}/ C_{Po-218})
30	0.01514	0.6826	$1.286 \cdot 10^{-2}$	0.6256	$5.893 \cdot 10^{-5}$	$4.582 \cdot 10^{-3}$ (C_{Rn}/ C_{Po-218})
50	0.02523	0.5766	$1.087 \cdot 10^{-2}$	0.5601	$8.794 \cdot 10^{-5}$	$8.090 \cdot 10^{-3}$ (C_{Rn}/ C_{Po-218})

Tabla IV.5. Influencia en la actividad recogida por el filtro de los tubos de difusión debida a la formación de ^{218}Po en tránsito por su interior. El parámetro R se refiere a la contribución de esta actividad respecto a la total recogida por el filtro.

IV.4.2 Influencia de la difusión axial

Con la solución numérica obtenida mediante técnicas de Monte-Carlo se puede considerar el fenómeno de la difusión axial incluyendo en el sorteo la longitud de difusión en la dirección axial según el eje z de la misma manera que para las otras longitudes (ecuaciones VI.33a y VI.33b). Se ha llevado a cabo una simulación por Monte-Carlo teniendo en cuenta el fenómeno de la difusión axial para un tubo de 10 cm de longitud y no se ha apreciado diferencia significativa en los resultados obtenidos. El error cometido por la propia simulación fue mayor que dicha diferencia.

IV.4.3 Fenómenos aerodinámicos

La penetración de partículas en tubos de difusión puede verse afectada por diversos factores aerodinámicos tales como, el desarrollo del perfil de velocidades, la perturbación provocada por filtro de salida del tubo en el perfil de velocidades y la rugosidad de la pared del tubo que también puede llevar a cambios en las velocidades del interior del tubo.

En cada uno de los siguientes apartados se evalúa la importancia de los fenómenos mencionados, utilizando las técnicas numéricas desarrolladas en este capítulo.

IV.4.3.1 Establecimiento del perfil de velocidades

Con la finalidad de evaluar la influencia que tiene el desarrollo del perfil de velocidades en los tubos de difusión, en la figura IV.9 se muestra la diferencia entre el valor de penetración para perfiles de velocidades plano, parabólico y en desarrollo para un tubo de 30 cm, radio de 1 cm, caudal de entrada de $74 \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ y viscosidad cinemática de $0.15 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. Si bien los valores de penetración no varían mucho respecto a la solución parabólica, debe tenerse en cuenta para la determinación del desarrollo del perfil de concentraciones que provoca una deposición superficial heterogénea en el filtro, tal como se analizará en el apartado IV.4.4

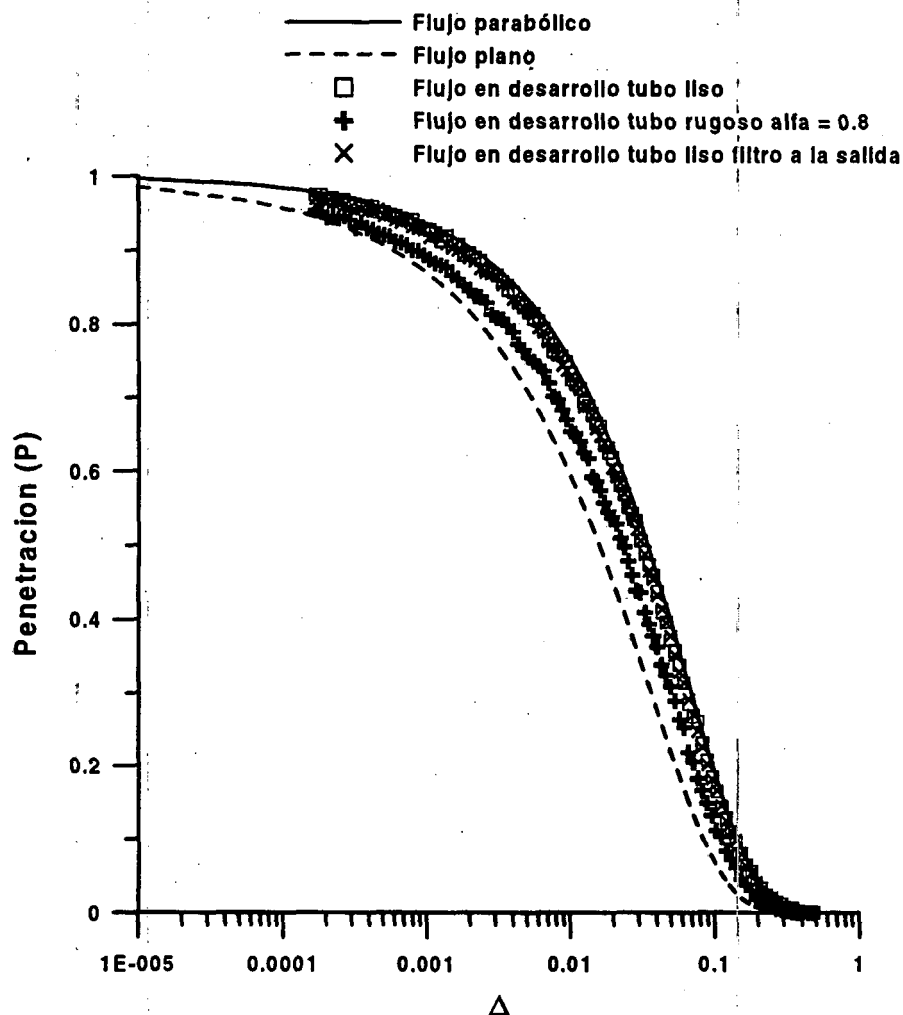


Fig. IV.9. Comparación entre las distribuciones de penetraciones calculadas suponiendo perfiles de velocidades plano, parabólico, en desarrollo con tubo liso y en desarrollo con un tubo de pared rugosa. Los valores de Δ corresponden a un tubo de 30 cm de longitud, 1 cm de radio y partículas de tamaño comprendido entre 0.1 nm y 10 nm.

IV.4.3.2 Perturbación debida al filtro de salida

En el apartado IV.2 se han establecido las condiciones de contorno que permiten considerar la perturbación en el perfil de velocidades como consecuencia del filtro situado en la salida del tubo de difusión. Se ha considerado que el filtro de salida provoca que la velocidad a su paso sea la misma en todo el plano perpendicular al eje del tubo. Esta condición de contorno debe ser tomada con cierta precaución ya que no ha podido comprobarse la perturbación producida en el perfil de velocidades como consecuencia de la presencia del filtro situado aguas abajo.

Los valores de penetración obtenidos teniendo en cuenta la perturbación provocada por el filtro se presentan en la figura IV.9. Si bien la diferencia obtenida

respecto al supuesto de considerar que el filtro no produce ninguna modificación en el perfil de velocidades es muy pequeña, se produce no obstante, una incidencia significativa en la deposición superficial de partículas en el filtro, tal como se estudiará en el apartado IV.4.4.

IV.4.3.3 Perturbación provocada por la rugosidad de las paredes del tubo

La rugosidad de la pared interior del tubo provoca cambios en el perfil de velocidades que puede llevar ocasionar modificaciones en la distribución de penetraciones de partículas. La rugosidad del tubo puede implementarse en la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes mediante la utilización de un parámetro de rugosidad, α . Si bien no se analizará el valor de dicho parámetro, se estudiará la influencia que puede tener en la distribución de penetraciones.

La condición de contorno que se ha aplicado en la pared del tubo hasta el momento ha sido suponer que la velocidad axial, U_p , es cero. Esta condición de contorno se ha implementado en el código desarrollado en este trabajo obligando a que la velocidad axial en el nodo virtual y en el que está en contacto con la pared tengan una velocidad media igual a cero:

$$\frac{u_{p+1} + u_{p-1}}{2} = 0 \Rightarrow u_{p+1} = -u_{p-1} \quad (\text{IV.47})$$

Una primera consideración que debe tenerse presente, con respecto a dicha condición de contorno es que la velocidad axial es cero exclusivamente en contacto con la pared y no en toda la celda. Así, desde un punto de vista de cálculo numérico, sería interesante permitir que la velocidad tuviera un cierto deslizamiento en la celda que está en contacto con la pared. Por otro lado, la rugosidad de la pared del tubo también puede ser modelizada permitiendo al fluido deslizar un cierto valor en la pared. Para introducir la condición de contorno que permita un cierto deslizamiento de la velocidad en la pared, se analiza, en primer lugar, la condición que permite el deslizamiento total. Esta condición, se representa forzando que la derivada de la velocidad axial en la pared sea cero:

$$\frac{u_{p+1} - u_{p-1}}{\Delta z} = 0 \Rightarrow u_{p+1} = u_{p-1} \quad (\text{IV.48})$$

La condición de contorno con la que se obtendría la solución que mejor modeliza el campo de velocidades es una intermedia entre las dos condiciones establecidas según las ecuaciones IV.47 y IV.48. Si se define el parámetro α como el grado de fluido ideal (condición IV.48) la condición de contorno es:

$$u_{p+1} = \frac{3\alpha - 1}{\alpha + 1} u_{p-1} \quad (\text{IV.49})$$

El parámetro α varía en el rango comprendido entre 0 y 1. Si vale 0 el fluido es real, mientras que para el valor de 1 el fluido es ideal. A título de ejemplo para evaluar la influencia del parámetro α en los valores de penetración se han realizado los cálculos para un tubo de 30 cm. Los resultados que se presentan en la figura IV.9 muestran la disminución significativa del valor de la penetración tal como también indica Malet y col. 1996.

IV.4.4 Influencia de la deposición heterogénea en el filtro

Otro factor que debe considerarse en la determinación del espectro dimensional de los descendientes del radón en estado libre, con el uso de tubos de difusión, es el cambio en la eficiencia de detección como consecuencia de la heterogeneidad de la distribución superficial de la actividad del ^{218}Po depositado en el filtro de salida.

Se presenta, en primer lugar, un estudio de la distribución del perfil de concentraciones de partículas en el tubo de difusión a distintas distancias desde el origen, de manera a analizar su evolución axial. Este estudio se ha llevado a cabo para los tamaños de partículas, de 0.5 nm y 0.9 nm por ser valores del tamaño de descendientes en estado libre del ^{218}Po indicados en la bibliografía. Las correspondientes simulaciones se han realizado mediante la técnica de Monte-Carlo descrita en el apartado IV.3 sorteando 10^5 partículas de cada diámetro y analizando su perfil de concentración a las distancias axiales de 0, 1, 10, 30 y 50 cm. El radio del tubo de difusión es de 1 cm, la velocidad de entrada de 22.3 cm s^{-1} y el perfil de velocidad se ha considerado plano. Los resultados obtenidos se presentan en las figuras IV.10 y IV.11.

En dichas figuras se observa la disminución de la densidad superficial de partículas en función del alejamiento respecto al eje del tubo. Por consiguiente, la densidad de partículas en la zona cercana a la pared es muy baja. Este hecho se debe a que en las zonas cercanas a la pared la corriente de difusión tiene un valor grande hacia la misma. Una segunda consecuencia es que la evolución del perfil de la densidad de partículas es más rápida cuanto mayor es el coeficiente de difusión de las partículas.

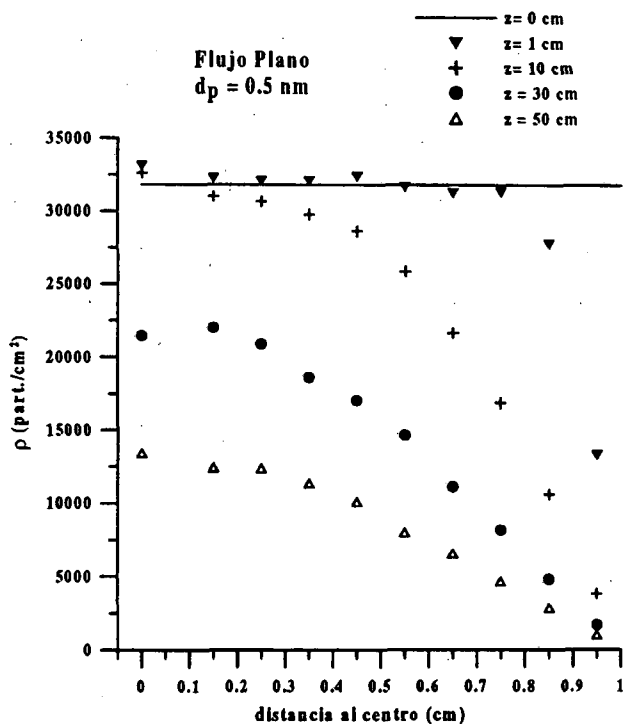


Fig. IV.10. Evolución axial de la densidad superficial de partículas en el interior de un tubo de difusión de 1 cm de radio, perfil plano de velocidades de 22.3 cm s^{-1} y diámetro de la partícula de 0.5 nm . Solución mediante 10^5 simulaciones y la aplicación de técnicas de Monte-Carlo.

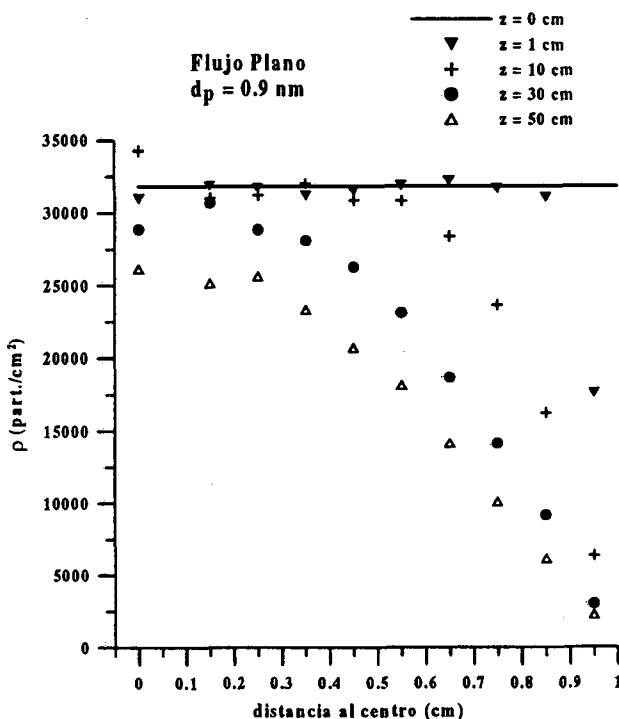


Fig. IV.11. Evolución axial de la densidad superficial de partículas en el interior de un tubo de difusión de 1 cm de radio, perfil plano de velocidades de 22.3 cm s^{-1} y diámetro de la partícula de 0.9 nm . Solución mediante 10^5 simulaciones y la aplicación de técnicas de Monte-Carlo.

Analizada la distribución del perfil de concentraciones en el interior del tubo se trata de verificar el efecto producido en la eficiencia de detección debida a la deposición heterogénea de partículas en el filtro de salida. Para alcanzar este objetivo, se ha realizado un programa de cálculo en FORTRAN que permite realizar las correspondientes estimaciones aplicando técnicas de Monte-Carlo. Para el desarrollo del programa de cálculo, el filtro de salida se ha dividido en anillos de igual grosor radial, Δr , en donde se depositan las partículas que atraviesan el tubo. Con esta disposición, se sorteja la dirección de salida de la partícula y su posición en el filtro, de acuerdo con el número de partículas presentes en cada uno de los anillos. El sorteo homogéneo de una dirección se lleva a cabo mediante el sorteo de dos números aleatorios:

$$\xi_1 = \cos \phi \quad (\text{IV.50a})$$

$$\phi = 2\pi \xi_2 \quad (\text{IV.50b})$$

donde ϕ es el ángulo de inclinación y ϕ es el ángulo azimutal.

La verificación del correcto funcionamiento del programa de cálculo propuesto se realiza mediante su comparación con soluciones analíticas aproximadas de la eficiencia considerando una distribución homogénea (Gardner y Verghese (1971)). Los cálculos de verificación se han realizado para un radio de la fuente (RS) de 0.9 cm que se ha dividido en 9 anillos de 0.1 cm de espesor, la distancia al detector es de 1 cm y se han tomado diversos valores del radio del detector (RD). La comparación entre los valores de la tabla de resultados obtenida por Gardner y Verghese (1971) y la solución por Monte-Carlo se ha llevado a cabo simulando la desintegración de 10^5 partículas. Los resultados se presentan en la tabla IV.6 donde, además, se incluye el cálculo por Monte-Carlo suponiendo un sorteo de la posición de la partícula según una distribución homogénea continua (ecuación IV.36a).

RS (cm)	RD (cm)	ϵ (Gardner y Verghese 1971)	ϵ (Monte-Carlo continuo)	ϵ (Monte-Carlo 9 anillos)
0.9	0.1	0.001581	0.00141	0.001280
0.9	0.5	0.03705	0.03673	0.03650
0.9	1.0	0.1214	0.1205	0.1202
0.9	2.0	0.2651	0.2657	0.2644
0.9	3.0	0.3376	0.3383	0.3369

Tabla IV.6. Comparación entre las eficiencias obtenidas de forma analítica por Gardner y Verghese (1971) y la solución numérica por técnicas de Monte-Carlo desarrollada en este trabajo.

Para evaluar la importancia del fenómeno de la heterogeneidad de la deposición de descendientes en el filtro de salida del sistema de medida diseñado en el capítulo V se ha elegido un filtro de 1 cm de radio dividido en 10 anillos, y un detector de 1 cm de radio, separados a una distancia de 0.3 mm. Con estos datos, y suponiendo una distribución superficial homogénea, la solución por Monte-Carlo en la simulación de 10^5 desintegraciones se ha estimado la eficiencia en 0.277. Este valor es el que se obtendría al realizar una calibración del sistema de detección utilizando una fuente de ^{241}Am . Previamente a la determinación de las eficiencias con una deposición

heterogénea de partículas se ha llevado a cabo un estudio del perfil de concentraciones de partículas en el interior del tubo de manera a evaluar la importancia de este fenómeno.

El cálculo de la eficiencia teniendo en cuenta la distribución heterogénea de partículas se ha llevado a cabo para tubos de 10, 30 y 50 cm de longitud y 1 cm de radio, con un caudal de aire de $74 \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, el perfil de velocidades en desarrollo, y considerando las opciones de que el filtro a la salida no perturba el campo de velocidad y que por el contrario lo perturba. El análisis realizado para tamaños de partículas de 0.5 nm, 0.67 nm y 0.9 nm se presenta en la tabla IV.7.

D_p (nm)	L (cm)	$\epsilon_{\text{con filtro}}$	$\epsilon_{\text{sin filtro}}$	% DF ϵ_{con} filtro	% DF ϵ_{sin} filtro
0.5	10	0.3022	0.3203	9.1	15.6
	30	0.3077	0.3259	11.1	17.7
	50	0.3086	0.3266	11.4	17.9
0.67	10	0.3000	0.3183	8.3	14.9
	30	0.3065	0.3248	10.6	17.3
	50	0.3079	0.3261	11.2	17.7
0.9	10	0.2973	0.3167	7.3	14.3
	30	0.3041	0.3236	9.8	16.8
	50	0.3079	0.3253	11.2	17.4

Tabla IV.7. Comparación entre las eficiencias de detección que se obtienen mediante la técnica de Monte-Carlo considerando la perturbación del filtro a la salida o considerando que no produce ningún tipo de perturbación para partículas de tamaño de 0.5 nm, 0.67 nm y 0.9 nm, y longitudes de tubo de 10 cm, 30 cm y 50 cm. En las dos últimas columnas se muestra la diferencia en % respecto a una deposición de partículas homogénea en el filtro ($\epsilon_{\text{homogénea}}=0.277$).

En la tabla IV.7 se presentan los valores de las eficiencias estimadas así como su diferencia relativa respecto al valor de la eficiencia suponiendo una distribución homogénea en el filtro ($\epsilon_{\text{homogénea}}=0.277$) ($DF = (\epsilon - \epsilon_{\text{homogénea}}) / \epsilon_{\text{homogénea}}$). Las conclusiones que se obtienen de los datos de la tabla son: a) la variación de la eficiencia debida a la heterogeneidad de la distribución superficial de partículas debe ser considerada cuando se evalúan los resultados experimentales; b) existe una diferencia considerable en el valor de la eficiencia dependiendo de cómo se considere la influencia del filtro. Como no se tiene la certeza de cual es su influencia real en el perfil de velocidades, se utilizarán las dos posibilidades analizadas en la evaluación de los resultados; y c) la diferencia de la eficiencia con la deposición homogénea es más importante para tubos largos y partículas de tamaño pequeño.

Referente a la influencia del filtro situado a la salida (punto b del párrafo anterior), los resultados parecen lógicos si se analiza los aspectos físicos del problema. Al suponer una perturbación en el perfil de velocidades debida al filtro, se produce una componente radial de la velocidad hacia la pared del tubo de manera que provoca un aplanamiento del perfil de concentración pero sin modificar significativamente el valor de la penetración.

Respecto al punto c), este hecho se debe a que tanto la longitud del tubo como la dimensión reducida de las partículas permiten que el perfil de concentraciones se desarrolle dando lugar a una mayor concentración de partículas en el centro del filtro.

IV.5 Conclusiones

La solución analítica de la distribución de penetraciones de los tubos de difusión requiere el uso de un gran número de hipótesis que impide disponer de una solución completa. Así, en este capítulo se ha desarrollado una solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes mediante el método Sola-Vof basado en una aplicación del método de diferencias finitas de manera que se consideran todos los fenómenos aerodinámicos que intervienen en el proceso. Una vez determinado el perfil de velocidades se ha resuelto mediante técnicas de Monte-Carlo la ecuación de transporte de partículas en el interior de un tubo cilíndrico. Se ha llevado a cabo un estudio del valor de penetración en cuanto a la influencia de distintos fenómenos tales como el de formación y desaparición de especies radiactivas, la difusión axial, las condiciones aerodinámicas del aire y la deposición heterogénea en el filtro. Del análisis realizado se ha puesto de manifiesto la gran heterogeneidad en la densidad de partículas superficial que se produce en el filtro de salida. Además, esta heterogeneidad varía según se considere o no la perturbación del filtro en el perfil de velocidades. Cabe señalar que la perturbación de un filtro, aguas abajo, en el perfil de velocidades no está perfectamente definida y por tanto en los siguientes capítulos de este trabajo deberán tenerse en cuenta dos hipótesis opuestas: en la primera, el filtro provoca que el perfil de velocidades sea plano y en la segunda, el perfil de velocidades no se ve modificado, siendo posiblemente la hipótesis correcta una intermedia.

Debido a la presencia de un cierto grado de heterogeneidad en la deposición de partículas en el filtro de salida del tubo de difusión se ha desarrollado un programa de cálculo basado en la técnica de Monte-Carlo que permite determinar la eficiencia de detección de partículas alfa con filtros cuya actividad no se distribuye de forma homogénea. Los resultados obtenidos han mostrado que esta eficiencia podía ser superior, debido a la mayor concentración de partículas en el centro del filtro, en más de un 15 % para los tubos de 50 cm de longitud. Este hecho obliga a realizar las correcciones oportunas en la aplicación de técnicas de medida con tubos de difusión.