



UNIVERSITAT
ROVIRA i VIRGILI

Universitat Rovira i Virgili

Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química

unir LA UNIVERSIDAD
EN INTERNET

Universidad Internacional de La Rioja

Escuela Superior de Ingeniería y tecnología

Máster Interuniversitario en Mecánica de Fluidos
Computacional

Estudio numérico de la evaporación de gotas de saliva en diferentes condiciones

Trabajo fin de estudio presentado por:	Juan Francisco Cerón Muñoz
Tipo de trabajo:	Simulación Numérica
Director/a:	Manuel Martínez del Álamo
Fecha:	22/06/2022

Resumen

Este trabajo sigue la línea de otros trabajos previos dedicados a conocer el comportamiento de las gotas de saliva que son exhaladas cuando se produce un fenómeno de tos o estornudo. La intención es poder determinar el posible riesgo de contagio en situaciones de pandemia como la de COVID-19, donde una de las principales vías de transmisión es a través de la inhalación del virus por las vías respiratorias.

Se ha fijado como dominio computacional el flujo en un habitáculo en el que se establece una corriente de aire desde la ventana hacia la puerta o viceversa. El volumen que representaría a una persona se ha colocado en el centro del dominio, y hace las veces de obstáculo y de punto de inyección de las gotas.

En el trabajo se ha definido un esquema de Euler-Lagrange que permite solucionar primero el flujo alrededor de la persona (utilizando un modelo RANS), y sobre ese campo de velocidades, realizar el cálculo de trayectorias de las gotas inyectadas al toser. El modelo Lagrangiano tiene en cuenta la evaporación de las gotas, y por tanto la evolución del diámetro medio de las mismas. Esto último es crítico para comprender las diferencias entre distintas condiciones ambientales, húmedas o secas.

Los resultados obtenidos muestran claras diferencias en función de la dirección del flujo establecido, y la presencia o no de obstáculos en su camino. Así mismo se ha podido calcular cómo evoluciona la concentración de gotas en el ambiente, así como el grado de dispersión de estas.

Se entiende por tanto este trabajo como base sobre la cual ir construyendo situaciones más complejas (incluir la acción de sistemas de ventilación u otros obstáculos) y modelos más completos (composiciones binarias de las gotas), que permitan parametrizar el riesgo en diversas situaciones.

Palabras clave: gotas, Euler-Lagrange, evaporación, condiciones ambientales, riesgo

Abstract

The present work is in line with other previous studies that are dedicated to increase our knowledge about the behavior of saliva droplets during coughing or sneezing. The main aim is to determine the potential infection risk during pandemic situations, as COVID-19, because as it has been established, airborne droplets is one of the preferred virus transmission routes.

The simulated geometry consists of a standard room where a door-to-window flow is established (or vice versa). In the center of the domain, the volume occupied by a person has been included, as an obstacle in the flow circulation. The saliva droplets injection point is located as it would be the person's mouth.

The numerical scheme consists of an Euler-Lagrange approach. At first, it is obtained the flow around the person, with a RANS model, and then, using this velocity field the saliva droplets trajectories are calculated once they are injected in the model. The Lagrangian approach considers the droplets' evaporation process, updating its diameter over the discretized time. This is crucial to understand the difference between dry or humid ambient conditions.

The numerical results show great differences depending on the flow direction, mostly explained by the presence of obstacles. It has been included in the work the evolution of droplets concentration in the risk zone (area close to respiratory tracts) and its dispersion with time.

This work can be used as the foundation to build a more complex model (including droplet binary composition) and study other flow structures (for example including HVAC equipment).

Keywords: droplets, Euler-Lagrange, evaporation, ambient conditions, risk

Índice de contenidos

1. Introducción	9
2. Estado del arte	10
2.1. Condiciones de frontera para la emisión de gotas	10
2.2. Esquemas CFD utilizados en la bibliografía. Modelo para la resolución de las trayectorias de las gotas de saliva.	13
2.3. Tipos de simulaciones realizadas. Principales resultados obtenidos.	16
3. Objetivos	18
4. Formulación del problema.	19
4.1. Geometría simulada.....	19
4.2. Modelo físico.....	20
4.3. Modelo matemático	21
4.3.1. Estrategia de simulación.....	21
4.3.2. Ecuaciones de gobierno de la fase Euleriana	26
4.3.3. Ecuaciones de gobierno de la fase Lagrangiana.....	27
4.4. Esquema numérico	31
4.4.1. Desarrollo de la malla. Estudio de sensibilidad.....	33
5. Validación modelo de evaporación.....	38
6. Casos simulados. Condiciones iniciales y de contorno.	41
6.1. Modelo de inyección de partículas.....	41
6.2. Condiciones de contorno. Casos planteados.....	43
7. Discusión de resultados.	46
7.1. Estructura del flujo alrededor de la persona	46
7.2. Distribución de partículas	50
7.3. Evaluación del riesgo potencial de inhalación de gotas	58

8. Conclusiones.	63
9. Trabajo futuro	65
10. Referencias.....	66
Anexo 1. Vistas de planta de dispersión de gotas	69

Índice de figuras

Figura 1. Dominio computacional. Ventana (derecha, arriba). Puerta y silueta humana (derecha, abajo).....	20
Figura 2. Detalle del volumen que representa una persona (izq.). Detalle de la boca (drch.).	20
Figura 3. Flujograma para la resolución de simulaciones. Esquema completo.	22
Figura 4. Flujograma para la resolución de simulaciones. Esquema simplificado.	24
Figura 5: Flujograma simplificado del algoritmo PIMPLE. Referencia: (Merkel, 2019).....	32
Figura 6. Malla basta. (Malla 1). Superficie correspondiente al suelo.....	34
Figura 7. Malla refinada. (Malla 2). Superficie correspondiente al suelo.	34
Figura 8. Malla refinada alrededor del cuerpo. (Malla 3). Superficie correspondiente al suelo.	35
Figura 9. Localización de las líneas para representar perfiles de velocidad. Plano Y=1.25m. .	36
Figura 10. Comparativa del perfil de velocidad U, a lo largo de Z, para X=1.7m, Y=1.25m.	37
Figura 11. Comparativa del perfil de velocidad U, a lo largo de Z, para X=2.1m, Y=1.25m.	38
Figura 12. Geometría y malla utilizada para la validación.	39
Figura 13. Comparativa entre resultados experimentales (Basu et al.) y simulación numérica para validación del modelo de evaporación.	40
Figura 14. Localización de los planos de visualización del flujo en la habitación.	46
Figura 15. Campo de velocidades. Plano Z=1.25m (arriba). Plano X=1.25m (abajo). Caso: WtD (T=20°C).....	47
Figura 16. Representación de Lambda2 (isocontornos). Caso: WtD (T=20°C)	48
Figura 17. Campo de velocidades. Plano Z=1.25m (arriba). Plano X=1.25m (abajo). Caso: DtW (T=20°C).....	49
Figura 18. Representación de Lambda2 (isocontornos). Caso: DtW (T=20°C)	50
Figura 19. Posición de las gotas, vista de perfil. Campo de velocidad en X para Z=1.25 m. Caso: HR=90 %, T=10 °C, flujo de ventana a puerta.	51

Figura 20. Posición de las gotas, vista de perfil. Campo de velocidad en X para Z=1.25m. Caso: HR=90 %, T=10 °C, flujo de puerta a ventana.	52
Figura 21. Histogramas de tamaño de gota en función del tiempo.....	53
Figura 22. Evolución de partículas activas.....	55
Figura 23. Evolución del diámetro medio de partículas.....	56
Figura 24. Estado de las gotas inyectadas. Caso T=20°C, HR=50%, WtD.....	57
Figura 25. Estado de las gotas inyectadas. Caso T=20°C, HR=50%, DtW.....	57
Figura 26. Concentración de gotas en zona de riesgo.....	59
Figura 27. Gotas evaporadas en la zona riesgo (izquierda). Gotas que llegan a alcanzar una cota inferior a 1 m. (derecha).....	60
Figura 28. Distancia al punto inyección en el plano horizontal.....	61
Figura 29. Distribución gotas plano Y=1.25. Caso flujo WtD. Contornos de velocidad en dirección X.	69
Figura 30. Distribución gotas plano Y=1.25. Caso flujo DtW. Contornos de velocidad en dirección X.	70

Índice de tablas

Tabla 1. Parámetros del modelo de inyección para el caso de tos.	41
Tabla 2. Condiciones de contorno para los casos simulados.	44
Tabla 3. Resumen de casos simulados	45

1. Introducción

La enfermedad de COVID-19 debida al virus SARS-COV-2 ha llevado hasta la fecha (marzo 2022 a más de 450 millones de contagios desde su aparición en la ciudad de Wuhan (China) en diciembre de 2019. En cuanto a la mortalidad el virus, 6 millones de personas han fallecido por esta causa, lo que indica el gran impacto que está teniendo esta enfermedad globalmente (World Health Organization, 2022).

De acuerdo con el conocimiento que tenemos actualmente, el virus se transmite de tres maneras diferentes: (1) por contacto directo con un infectado, (2) por aquellas partículas que se expulsan al respirar, hablar, toser o estornudar y que viajan por el aire desde el sujeto infectado hasta las cavidades nasales, ojos o boca de otra persona; y por último (3) al tocar superficies que han sido contaminadas por gotas de saliva que contienen virus. Esta última forma de transmisión, de acuerdo con algunos autores (Lewis, 2021), tiene una menor relevancia que las dos primeras. Por tanto, de los dos modos restantes, si el contacto directo es evitable, la que tiene mayor potencial de transmisión es la debida a las gotas o aerosoles transportados por el aire (Zhang et al., 2020) .

Por tanto, la siguiente pregunta que otros autores han tratado de responder es conocer el tiempo de supervivencia del virus en un aerosol. De la bibliografía estudiada son muchos los autores que destacan el trabajo de van Doremalen et al. (2020), donde se observó de manera experimental esta materia, hallándose que el virus seguía estando activo hasta 3 horas, siendo su vida media entre 1.1 y 1.2 horas. Esta conclusión hace que sea de vital importancia conocer cuánto tiempo y cuán lejos pueden moverse las gotas expulsadas por un sujeto infectado, así como la transición de estas a su forma de aerosol, que como se verá más adelante puede llevar a extender en el aire su permanencia.

2. Estado del arte

Han sido numerosos los autores que han estudiado la dispersión y distribución de partículas que son transportadas por el aire. La simulación numérica, y concretamente el uso de herramientas de Mecánica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) ha propiciado el estudio de gran variedad de situaciones (ambiente estático, con ventilación forzada...) y en muy diversas geometrías (en ascensores, en vagones de tren).

A continuación, se describen algunos de los últimos estudios desarrollados, centrando el análisis en el modelo físico y el esquema numérico utilizado, así como las condiciones de contorno utilizadas. Se hace hincapié en los modelos utilizados para la descripción del proceso de evaporación de las gotas de saliva, siendo esto último un aspecto clave para poder determinar el tiempo que las gotas permanecen en el ambiente.

2.1. Condiciones de frontera para la emisión de gotas

Uno de los problemas principales a los que se enfrentan los investigadores que tratan de inferir la distribución de partículas, es establecer las condiciones de frontera en el foco de emisión, es decir, en el sujeto que habla, tose o estornuda. Para poder cerrar el problema deberíamos conocer:

- Velocidad y tiempo a la que salen las gotas de la boca.
- Distribución de tamaño de partículas.
- Masa total inyectada (número de partículas).
- Temperatura
- Composición de las gotas de saliva.

Zhu et al. (2005) utilizó la técnica de velocimetría de imagen de partículas (PIV, por sus siglas en inglés), con una frecuencia muy alta (cada 5ms). En este estudio se concluyó que las velocidades a la que expulsan las gotas están entre 6-22 m/s (siendo la media de 11.7 m/s). En el estudio también se midió la cantidad de saliva en cada estornudo, moviéndose en valores entre 6-8 mg.

En cuanto a la distribución de tamaños de partículas existen multitud de trabajos que han profundizado sobre este tema. El mayor número de literatura se concentra en las

investigaciones acerca de los tamaños durante el estornudo. Entre los más antiguos está el trabajo de Duguid (1946), en el que se utilizaba una serie de marcadores que después se medían con un microscopio. Más recientemente está el trabajo de Chao et al. (2009) en el que se analiza la distribución de tamaños durante un estornudo y también mientras se habla. En este caso el tamaño de las gotas se mide utilizando una técnica denominada IMI (“Inferometric Mie Imaging”), al tiempo que se utiliza PIV para medir la velocidad de estas. Este método experimental, no invasivo, permite poder medir muy cerca de la boca, de manera que se elimina prácticamente el efecto de evaporación. El valor medio geométrico del diámetro para casos de estornudos es de $16\mu\text{m}$, y de $13.5\mu\text{m}$ mientras se habla. En cuanto al número de gotas, en el caso del estornudo el rango es 974-2085 y mientras se habla de 112-6720. Los resultados de las distribuciones de tamaño obtenidos se parecen bastante a los que se obtuvieron mucho antes por Duguid (1946), sin embargo, con esta técnica experimental no se puede medir tamaños por debajo de la micra, como han reportado otros autores (Morawska, 2008), por lo que existe cierto sesgo en los resultados.

Estudios más recientes se han enfocado, no solo a lo que ocurre al toser o estornudar, sino también a describir de manera más específica la distribución y número de partículas/gotas de saliva que se producen mientras se habla durante un periodo de tiempo continuado. En el trabajo de Asadi et al. (2019) se reportó que el ratio de partículas emitidas durante una conversación normal está directamente correlacionado con el volumen al hablar, yendo desde 0.06 partículas por cm^3 para el caso de voz baja (baja amplitud) hasta 3 partículas por cm^3 para amplitudes altas.

Otros autores como Lindsley et al. (2012) han estudiado el efecto que tiene que el sujeto esté sometido a un virus (en este caso, gripe), con un sujeto sano. Observaron que, para una persona sin síntomas el volumen de gotas cada vez que tosía era de media 26.4 pL (con una desviación estándar de 45.6), mientras que si estaba enfermo la media ascendía a 38.3 pL (con una desviación estándar de 43.7).

En cuanto a la composición de las gotas de saliva, la gran mayoría de los estudios consultados aproximan la composición en un 100% agua. Sin embargo, aunque la mayor parte de la composición es agua (~99%), la saliva está compuesta por otras sustancias como proteínas, enzimas, células epiteliales, etc. Estos compuestos no son volátiles, lo que significa que las gotas de saliva no se evaporan por completo, quedando por tanto estos residuos. En

consecuencia, estos compuestos no volátiles y de diminuto tamaño pueden quedar suspendidos en el aire durante horas. El virus puede sobrevivir a este proceso de “secado” de las gotas de saliva, y permanecer activo en ese residuo. Por tanto, es importante poder modelizar de manera acertada el tamaño de las partículas una vez ha concluido la evaporación de agua, por lo que conocer la composición de partida cobra importancia.

Como se explica en el trabajo de Stiti et al. (2021), han sido varios los estudios que proponen como simplificación más acertada la de suponer que la saliva se trata de una mezcla binaria de agua y sal (NaCl), haciendo que la sal sea la que reemplaza a todos los componentes no volátiles presentes. Esta suposición simplifica en gran medida la modelización de proceso de evaporación de las gotas de saliva, sin embargo, queda por fijar la cantidad de NaCl presente, pues este parámetro condicionará de forma directa el tamaño del residuo sólido final, así como la tasa de evaporación. Para poder determinar la composición inicial de NaCl, Stiti et al. (2021) llevan a cabo un experimento en donde dejan gotas de saliva suspendidas en un levitador ultrasónico hasta que la evaporación de agua se ha completado, y posteriormente comparan las dimensiones del residuo final como el diámetro de partida de la gota. Durante el experimento se observa como la gota, inicialmente transparente, se va volviendo opaca a medida que el agua se evapora, transformación debida a la concentración de material no-volátil. Aunque las gotas iniciales son esféricas, el residuo sólido (cristales) que quedan tras la evaporación no lo son. En este ensayo experimental utilizaron muestras de gotas de saliva de 5 hombres y 5 mujeres, 30 gotas por cada sujeto, con diámetros que iban de los 120 μm hasta los 300 μm . Observaron que el ratio de diámetro del residuo frente al diámetro inicial era de 0.235 (± 0.019), y que, por lo tanto, considerando que la máxima fracción másica de sal en agua en el punto de saturación es de 357 g/kg, la concentración inicial de sal en saliva varía entre 3.18 g/kg y 9 g/kg. Como valor de compromiso, en su estudio numérico posterior utilizaron un valor de 6 g/kg.

En cuanto a la temperatura de las gotas, la mayoría de los estudios consultados asumen que saldrá a la temperatura corporal, esto es unos 35-36 $^{\circ}\text{C}$.

2.2. Esquemas CFD utilizados en la bibliografía. Modelo para la resolución de las trayectorias de las gotas de saliva.

Para poder conocer hasta qué punto el virus (activo en las gotas de saliva expulsadas por la boca) se puede mover y mantenerse en el aire que rodea al sujeto infectado es necesario poder describir de la manera más precisa posible las trayectorias de estas gotas. Además de esto, ya es conocido que la distribución de tamaños de gotas desde que son expulsadas de la boca no permanece uniforme, sino que, debido a la evaporación, el diámetro de estas se va reduciendo, provocando la formación de un aerosol que puede permanecer en el aire durante mucho más tiempo.

En la bibliografía se pueden encontrar multitud de estudios CFD destinados a describir el comportamiento de las partículas/gotas en diferentes escenarios y geometrías. Si nos centramos en el esquema numérico utilizado, una amplia mayoría de los estudios resuelven la fase continua, el aire que rodea a las partículas, desde un enfoque Euleriano, bien con esquemas RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) o LES (Large Eddy Simulation); mientras que la fase discreta, las gotas, se modelizan con un enfoque Lagrangiano. Estos esquemas numéricos son válidos cuando existe una fase muy dispersa, en este caso, las gotas de saliva; siendo el grado de interacción entre ambas fases mayoritariamente unidireccional, es decir, el flujo de aire determina la trayectoria de las gotas, sin embargo, las gotas apenas tienen influencia sobre la solución de la fase continua.

Entre los estudios iniciales que tratan el problema utilizando CFD, se encuentra el trabajo de Zhu et al. (2005). Estos autores trataron el problema del transporte de gotas al estornudar en ambientes calmados, desde el punto de vista experimental, pero también numérico. Su planteamiento fue el de utilizar un modelo RANS para resolver el campo de velocidades de la fase continua, concretamente utilizando un modelo de turbulencia $k-\epsilon$. De esta manera, obtuvieron un campo de velocidades estacionario. Una vez conocida la solución al campo de velocidades de la fase gaseosa, plantearon la resolución de las trayectorias que seguirán las gotas de saliva.

Una cuestión importante aquí, y que determina como los efectos de la turbulencia terminan influyendo sobre las trayectorias de las gotas, es como definir el valor instantáneo de la

velocidad. Como resultado del modelo RANS utilizado se obtiene el valor promedio de la misma, \bar{u} , por tanto, para poder determinar la solución instantánea se hace necesario poder conocer el valor fluctuante u' , y de ahí: $\vec{u} = \bar{u} + u'$. En el caso de Zhu et al. (2005), el valor de \vec{u} , se obtiene añadiendo una perturbación aleatoria que sigue una distribución gaussiana cuya densidad de probabilidad es función de la energía cinética turbulenta. La mayoría de los autores suelen seguir aproximaciones similares. En este trabajo se ha procedido de igual manera, más adelante se explican los detalles.

Un enfoque muy similar a este se puede encontrar en trabajos como el de Zhang & Chen (2006). En ambos trabajos, existen asunciones importantes, como por ejemplo el modelado de las gotas de saliva, solo comprende la ecuación de movimiento y no incorpora la evaporación, que como se verá tiene un efecto importante sobre el tiempo en que estas pueden permanecer en el aire.

Tras la aparición del virus SARS-COV-2, han sido numerosos los trabajos que han ampliado y mejorado los esquemas numéricos utilizados previamente. Entre los primeros artículos publicados tras el inicio de la pandemia se encuentra el trabajo de Feng et al. (2020). Este trabajo incorpora, dentro del enfoque Lagrangiano para el cálculo de trayectorias, la evaporación de gotas de saliva. En cuanto a la modelización de la ecuación de movimiento de las partículas, los cambios con respecto al modelo antes presentado son pequeños. Como se ha adelantado la principal diferencia está en la resolución de dos ecuaciones adicionales:

- Balance de masa en cada gota.

$$\frac{dm_l}{dt} = f(Sh, D, d_p, Y_{v,\infty}, Y_{v,surf}) \quad (2.1)$$

El ratio de pérdida de masa (liquida) de cada gota, será función de la difusividad (D) del componente evaporado (agua), del número de Sherwood (Sh), en este trabajo utilizan una correlación), $Y_{v,\infty}$, es la fracción másica de vapor en la fase gaseosa (aire) e $Y_{v,surf}$, es la fracción másica de vapor en la superficie de la gota. Como es de esperar, $Y_{v,\infty}$, será función de las condiciones ambientales en las que se está modelizando la dispersión de gotas: la temperatura ambiental y la humedad relativa. Y, por otro lado, $Y_{v,surf}$, que a su vez será función de la presión de saturación a la temperatura de la gota, así como de la fracción másica del componente evaporado. Diferentes expresiones para calcular estos mismos parámetros se pueden encontrar en el trabajo de Visione et al. (2021).

- Balance de energía en cada gota.

Por tanto, para poder resolver el balance de masa, se debe conocer la temperatura de la gota, que a su vez es posible obtener resolviendo la ecuación de conservación de la energía. Como se observa en la siguiente ecuación, la tasa de cambio de la temperatura de la gota será función de la pérdida de calor sensible y calor latente:

$$m_l C_{p,l} \frac{dT_s}{dt} = \pi d_d k_g Nu (T_s - T_\infty) + \frac{dm_l}{dt} h_{fg} \quad (2.2)$$

El primer término de la parte derecha de la ecuación es el que tiene en cuenta la pérdida o ganancia de calor sensible y que es función de: la temperatura superficial de la gota (T_s), la temperatura del flujo alrededor de la gota (T_∞), la conductividad del aire (k_g), el diámetro de la gota (d_d) y el número de Nusselt (Nu). El segundo término tiene en cuenta el calor latente de vaporización como producto de la variación de la masa de la gota ($\frac{dm_l}{dt}$) y el calor latente de vaporización del agua (h_{fg}). Estos dos términos son igual a la variación de energía por unidad de tiempo definida como el producto de la masa de la gota (m_l), el calor específico ($C_{p,l}$) y la variación de temperatura por unidad de tiempo ($\frac{dT_s}{dt}$).

A partir de la resolución de ambas ecuaciones, es posible determinar la “pérdida” de masa de la gota, y de ahí, conocer cómo se va reduciendo su diámetro.

Por último, resaltar algunos trabajos recientemente publicados que aportan esquemas numéricos algo más elaborados que lo hasta ahora presentados. Por ejemplo, es el caso de Visione et al. (2021), estos autores también utilizan un enfoque Euleriano-Lagrangiano, pero en lugar de un acoplamiento unidireccional, incluyen una serie de términos fuente en las ecuaciones a resolver en la fase continua (esquema Euleriano), de manera que se consigue un acoplamiento bidireccional. Es decir, al ir resolviendo las ecuaciones que describen las gotas, estas influirán sobre el flujo de la fase gaseosa. En los trabajos anteriores este acoplamiento es unidireccional, las trayectorias de las gotas no tienen influencia sobre la resolución de las ecuaciones RANS del esquema Euleriano. Además de esto, en este trabajo también se incluye la posibilidad de que las gotas no estén formadas 100% por agua, sino que sean una mezcla binaria agua-sal, incluyendo en el modelo una ecuación de balance de masa por especie, y un modelo para describir el crecimiento de cristales de sal, una vez que la concentración (debido a la evaporación de agua) es lo suficientemente grande.

Uno de los trabajos más completos que estudian el fenómeno de evaporación de gotas de saliva es el desarrollado por Stiti et al. (2021). En este caso, en lugar de resolver numéricamente el flujo de aire que transporta las gotas de saliva, los autores utilizan correlaciones desarrolladas por otros investigadores que ofrecen la descripción del campo de velocidades para el caso de un estornudo. Por tanto, utilizando como input el campo de velocidades en la fase gaseosa para resolver el resto de las ecuaciones que describen las trayectorias y transformación de las gotas. Para validar el modelo, los autores han presentado la evolución temporal del diámetro de una gota de saliva de $121 \mu\text{m}$ en un ambiente a $22 \text{ }^\circ\text{C}$ y 55% de humedad relativa obtenido de manera experimental y numérica. Los resultados mostrados muestran un grado de acuerdo muy bueno, señalando que la pérdida de diámetro sigue una ley cuadrática hasta que la curva se aplana, indicando que se ha alcanzado el tamaño residual.

Entre los últimos resultados publicados se encuentra el trabajo de Biswas et al. (2022). En este caso también se incorpora a las ecuaciones del modelo Lagrangiano la consideración de las gotas como una mezcla binaria de agua y sal. El enfoque, como el del resto de los autores, ha sido Euleriano (para la resolución de las ecuaciones RANS de la fase continua, utilizado un modelo de turbulencia $k-\omega$) – Lagrangiano (para el cálculo de las trayectorias y transformación de las gotas). El modelo ha sido validado utilizando una simulación de una sola gota inmersa en un flujo estático. Para poder modelar esta gota en levitación, se introduce en el dominio computacional con una velocidad inicial nula, y no se aplican sobre ella ninguna fuerza. Lo que se observa es como la gota se va evaporando, y reduciendo su diámetro a medida que transcurre el tiempo. Los resultados se han comparado con observaciones experimentales, llegando un buen grado de acuerdo.

2.3. Tipos de simulaciones realizadas. Principales resultados obtenidos.

Como se ha mencionado anteriormente, uno de los trabajos más elaborados desde el punto de vista experimental y numérico es el de Stiti et al. (2021), donde se estudia en profundidad el fenómeno de evaporación de las gotas, y la transformación de estas desde su emisión hasta que todo el contenido volátil se evapora y solo queda el residuo ('droplet nuclei'). En la parte numérica de su estudio, partiendo de una simplificación de estornudo (flujo totalmente

horizontal) simulan el comportamiento de partículas de 20, 50 75 y 100 μm , bajo diferentes condiciones de humedad relativa, para obtener la distancia horizontal necesaria para que las partículas lleguen al suelo.

Los autores definen un diámetro de gota crítico por debajo del cual la gota se ha evaporado antes de llegar al suelo, mientras que, por encima del mismo, la gota llega a depositarse en el suelo. Este diámetro crítico es función de la altura del punto de inyección y de las condiciones ambientales, que pueden favorecer la evaporación. De esta manera establecen que para una humedad relativa del 60 %, partículas por debajo de 80 μm se evaporarán antes de tocar el suelo. También calcularon la distancia horizontal recorrida por la partícula para varios diámetros y para diversas condiciones ambientales. En el trabajo se concluye que es posible establecer un diámetro óptimo en el que la partícula recorre más distancia hasta evaporarse y solo quedar un residuo cristalizado. De acuerdo con los autores, este residuo podría tener una alta probabilidad de contener al virus, de tal manera que su potencialidad de contagio es alta, pues dado su reducido tamaño puede quedar suspendido durante más tiempo que la gota que lo contenía.

En el trabajo de Biswas et al. (2022) se simula la dispersión y evaporación de gotas de saliva durante un estornudo en el interior de un ascensor bajo tres escenarios diferentes: en un ambiente estático, con un flujo entrante de aire por el techo ("jet") y con una aspiración de aire desde el techo. Estos escenarios se evalúan para dos condiciones ambientales diferentes: un ambiente seco y cálido y otro húmedo y frío.

Las principales conclusiones que se obtienen son que el peor escenario es el del ambiente estático, comprobándose que multitud de partículas quedan suspendidas en el aire. En este mismo escenario, para el caso de ambientes secos y cálidos, el riesgo es mayor en comparación con el ambiente húmedo y frío; la razón es la mayor evaporación en el primer caso, que lleva a reducir el tamaño de las gotas lo que hace que quede suspendidas a una altura mayor que para el caso de ambiente húmedo, donde la evaporación es casi despreciable y las gotas tienden a descender en menor tiempo. En el caso de una ventilación forzada desde el techo del elevado se mejora la exposición al riesgo, aunque siguen existiendo partículas en suspensión. De los escenarios evaluados el que mejor resultados ofrece es el de la extracción forzada, encontrándose que, a los pocos segundos del estornudo, ya no quedan partículas dentro del dominio computacional. Lo que se observa es que el hecho de incluir algún tipo de

ventilación forzada parece mejorar la exposición al riesgo, aunque al tener mayores velocidades también acelera el proceso de evaporación e incrementa la turbulencia pudiéndose generar mayor dispersión de las gotas de saliva.

3. Objetivos

Los objetivos de este TFM son:

- Plantear un modelo que permita obtener mediante simulación numérica la trayectoria de las gotas de saliva de en diferentes condiciones. De acuerdo con el estado del arte, el modelo planteado debe incorporar:
 - Enfoque Euleriano-Lagrangiano: para la fase continua (aire) euleriano y para la discreta (gotas de saliva) lagrangiano.
 - Resolución del flujo de aire mediante modelo RANS.
 - El modelo de las gotas incluirá la resolución de las siguientes ecuaciones:
 - Balance de cantidad de movimiento.
 - Balance de masa de la gota
 - Balance de energía

Este modelo debe permitir describir las trayectorias de las gotas y así como la evaporación de estas.

- Encontrar y modificar solver de *OpenFOAM*¹ capaz reflejar el modelo físico planteado para ser resuelto mediante volúmenes finitos. Fijar un esquema numérico adecuado.
- Plantear una geometría sencilla, formada por un volumen con una entrada que haría las veces de boca desde donde se emitirían las partículas. En esta geometría, sería posible incluir otras entradas de aire para simular condiciones específicas de ventilación.
- Validar el modelo de evaporación de las gotas, de manera similar al tipo de validación realizada por Visione et al. (2021).

¹ OpenFOAM es un software CFD de código abierto. Ha sido desarrollado utilizando lenguaje C++. Es utilizado para la resolución de flujo de fluidos que puede incluir: turbulencia, transferencia de calor, reacción química...

- Simular diferentes escenarios en función de diferentes condiciones ambientales (humedad relativa, temperatura) y estructuras del flujo de aire.
- En función de los parámetros simulados obtener gráficos de riesgo potencial en función del tiempo y la distancia que las gotas permanecen y se distribuyen por el ambiente.

4. Formulación del problema.

4.1. GEOMETRÍA SIMULADA

El dominio computacional simulado representa una habitación típica de tamaño estándar de 2.5 m x 4 m de superficie y 2.5 m de altura. Este dominio paralelepípedo está formado por seis paredes, en las cuales se han incluido dos aberturas simulando una ventana y una puerta. La puerta y la ventana se encuentran en paredes enfrentadas y sus dimensiones son de 1 m x 1 m para el caso de la ventana y de 1 m x 2 m para la puerta.

En el centro del dominio se ha incluido la figura de una persona de manera simplificada, con una altura de 1.75 m. El volumen ocupado por la persona no forma parte del dominio computacional, es decir, dicho volumen se ha restado del que conforman las seis paredes de la habitación. Sobre la superficie del dominio que correspondería a la cara de la persona, se ha definido una superficie rectangular que representaría la boca, y que servirá como elemento origen del que partirán las partículas inyectadas en el modelo. Las dimensiones de la boca se han obtenido siguiendo el trabajo de Chillón et al. (2021), con un ancho de 40 mm y una altura de 5 mm.

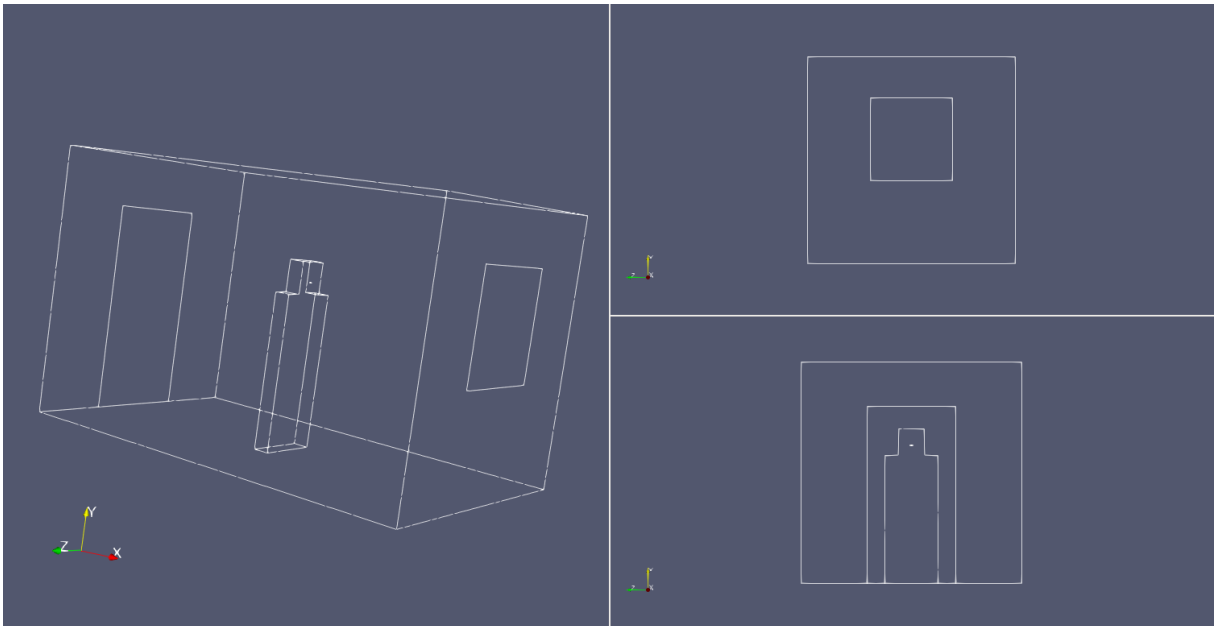


Figura 1. Dominio computacional. Ventana (derecha, arriba). Puerta y silueta humana (derecha, abajo).

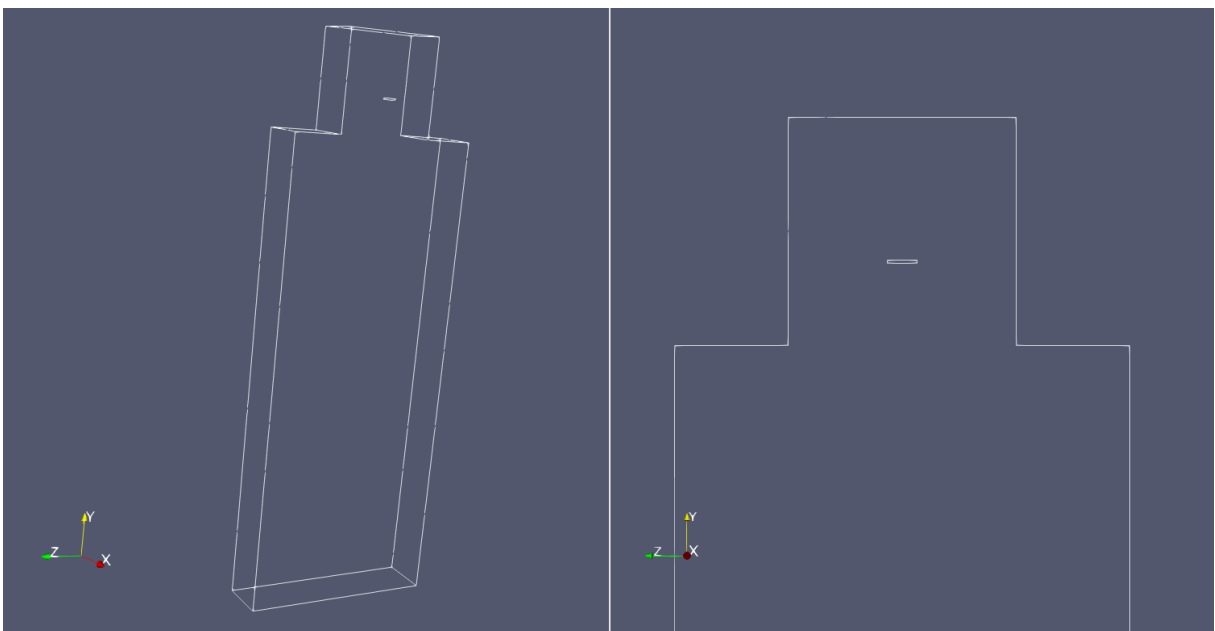


Figura 2. Detalle del volumen que representa una persona (izq.). Detalle de la boca (drch.).

4.2. MODELO FÍSICO

El modelo físico que define el problema tiene por objetivos:

- Modelizar el flujo de aire alrededor de volumen que representa a la persona, cuando se establece una corriente de aire, bien desde la ventana hacia la puerta, o viceversa.

- El fluido alrededor de la persona estará compuesto por una mezcla de aire (O_2 y N_2 , 21 % y 79 % respectivamente) y vapor de agua, para poder representar ciertas condiciones de humedad relativa en el ambiente. Por tanto, el modelo matemático deberá contener las ecuaciones necesarias para el transporte de la especie acuosa en el seno del gas.
- Junto con la simulación de la fase continua, la parte más importante en el problema es la resolución de las trayectorias de las gotas de saliva que acompañan a la tos. La trayectoria de estas gotas vendrá determinada por la interacción con el campo de velocidades de fluido que rodea, así como la velocidad inicial impuesta en la propia gota.
- Además de la resolución de la cinética de las gotas de saliva, es necesario conocer la evolución de su tamaño una vez inyectadas en el modelo, pues a su vez, el tamaño de la gota también tendrá impacto sobre las fuerzas de flotación y de arrastre. El efecto más importante que determina la variación de diámetro de las gotas es la evaporación de estas debido al gradiente de concentración de vapor de agua entre la superficie de la gota y el ambiente que le rodea.

4.3. MODELO MATEMÁTICO

El enfoque seguido para llegar a simular los puntos del apartado anterior es Euleriano-Lagrangiano. Como en la mayoría de los últimos trabajos publicados, el fluido que transporta las gotas, la corriente de aire húmedo (fase continua), se modeliza utilizando un esquema Euleriano, mientras que las gotas de saliva (fase discreta), se modelizan utilizando un esquema Lagrangiano.

4.3.1. Estrategia de simulación

Existen diferentes estrategias para la resolución del problema en función de cómo interactúan entre sí la parte Euleriana y Lagrangiana de nuestro problema. A continuación, se presentan dos estrategias que se han estudiado durante el desarrollo de este trabajo.

En el primer flujograma (Figura 3), se representa el que sería el esquema de resolución más completo, y que permite una interacción bidireccional entre el flujo de la fase continua y las gotas de la fase discreta.

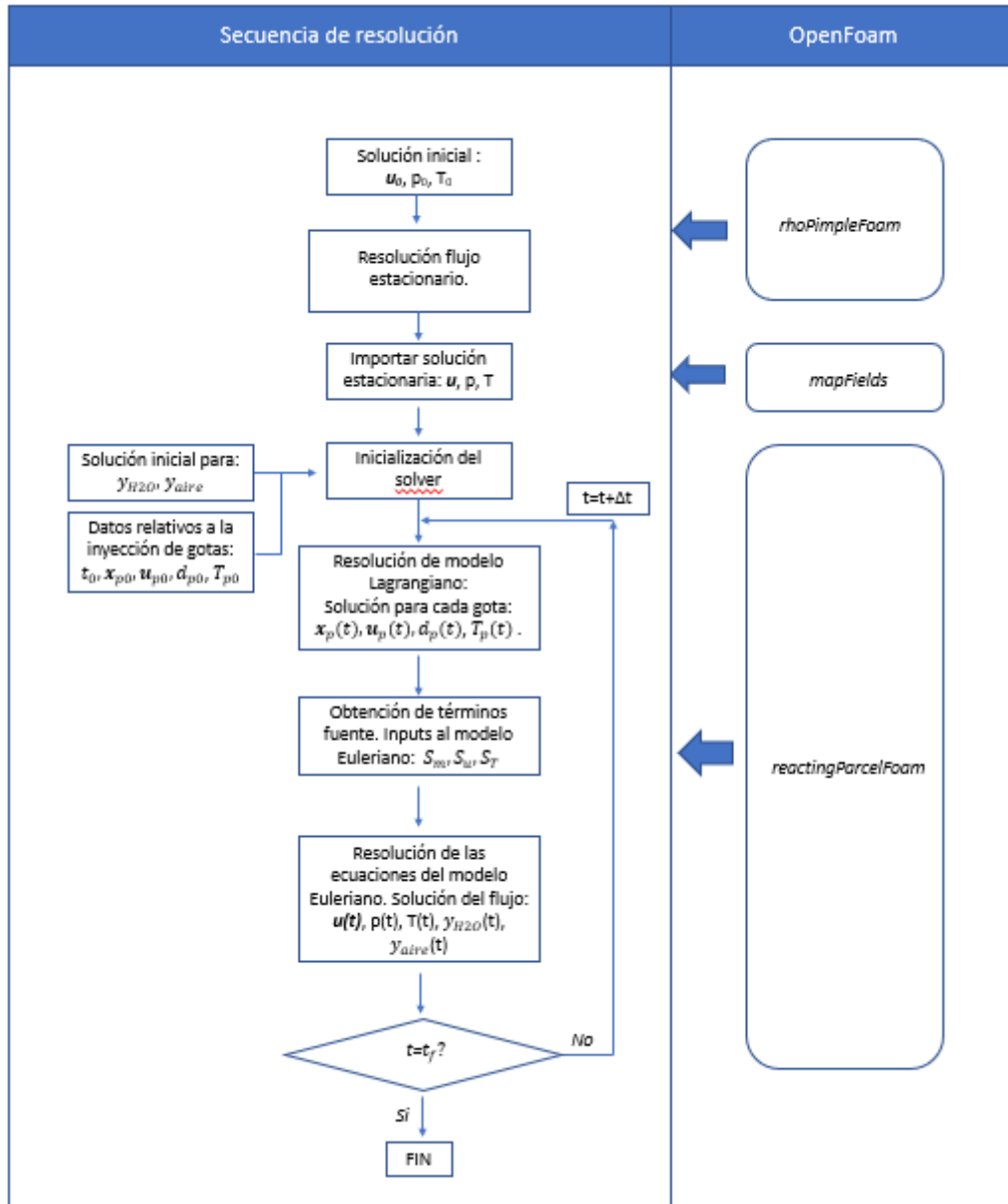


Figura 3. Flujograma para la resolución de simulaciones. Esquema completo.

Con el objetivo de optimizar los recursos computacionales, en primer lugar, se resuelve el flujo de aire que se haya establecido de partida. Una vez alcanzada una solución estacionaria, esta se utiliza para inicializar el cálculo con el solver “reactingParcelFoam”.

Junto con el campo de velocidades, presión y temperatura del flujo, se introducen como input al solver, el valor inicial de fracción másica de aire y agua (estos campos no provienen de la solución estacionaria, pues el solver inicial no es multicomponente). Además, se introducen todos los datos necesarios relativos a la inyección de partículas: su velocidad, tamaño y temperatura inicial, así como el punto de inyección; más adelante se verá con detalle cómo se han introducido estos valores de entrada.

A partir de este punto, el solver, en primer lugar, realiza el cálculo de la velocidad y temperatura para cada partícula, actualizando su trayectoria. Además, se calcula la masa, cantidad de movimiento y energía, transferidos hacia el flujo que rodea a las gotas. En apartados siguientes se presentarán las ecuaciones que se resuelven y los esquemas numéricos utilizados.

Hecho esto, se recalcula el dominio Euleriano, obteniéndose una actualización de los campos de presión, velocidad, temperatura y fracciones másicas de cada especie (agua y aire) para el flujo de aire que rodea a las partículas inyectadas. Este ciclo se repite para cada paso de tiempo, hasta que se alcanza el tiempo final de la simulación.

Este procedimiento supone un coste computacional alto, pues, dependiendo de la velocidad del flujo, el paso de tiempo requerido puede ser muy pequeño, lo que supone tener que resolver las ecuaciones que gobiernan el flujo con mucha frecuencia.

Un procedimiento alternativo al presentado en la Figura 3, es el que se describe en el siguiente flujograma (Figura 4). En este caso, la solución estacionaria que se obtiene inicialmente no es actualizada en cada paso de tiempo. Esto quiere decir que las trayectorias de las partículas se recalculan en cada paso de tiempo, pero la velocidad a la que están sometidas por el flujo principal no cambia.

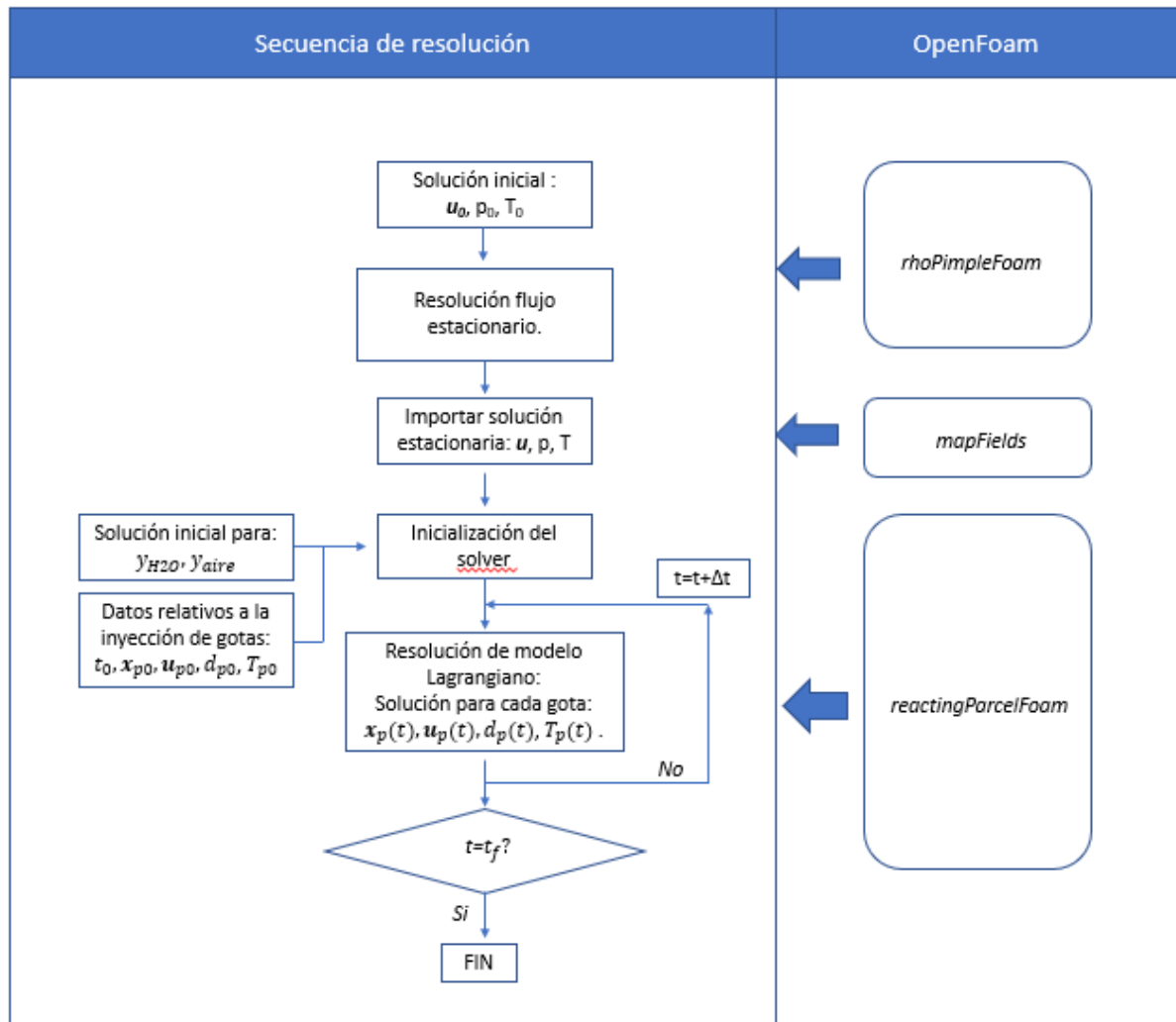


Figura 4. Flujograma para la resolución de simulaciones. Esquema simplificado.

Esta simplificación del procedimiento de resolución supone:

- Se trabaja con un flujo estacionario. Para el problema objeto de estudio, se está realizando una simplificación importante, pues si se quiere simular la tos o un estornudo, se sabe que la física del problema comprende la expulsión de gotas, que vienen acompañadas de un flujo de aire de entrada al dominio. En el caso simplificado, al tener un campo de velocidades estacionario, no se puede simular la salida de aire junto con las gotas. Esto tendrá cierta influencia sobre la trayectoria de las partículas, sobre todo en los instantes posteriores a su inyección en el modelo. Además, por la bibliografía consultada, este chorro súbito de entrada al dominio supone un aumento de la turbulencia en la región

cercana a la boca, que tiende a provocar cierta dispersión de las partículas, que para este procedimiento de resolución se estaría obviando.

- La otra simplificación, aunque menos importante, es la de eliminar la bidireccionalidad en la interacción entre las gotas de saliva y el aire. Como se ha representado en el esquema de la Figura 3, al resolver las ecuaciones de movimiento y energía en cada partícula, se calcula la transferencia de masa, momento y energía entre estas y el flujo principal. Es decir, se está computando la influencia del movimiento de las gotas sobre la fase continua. Estos términos se añaden en forma de términos fuente en cada una de las ecuaciones de transporte del esquema Euleriano. De esta forma, no es únicamente el flujo de aire quien tiene influencia sobre las gotas, sino que también se calcula lo inverso. Dado lo disperso de las gotas dentro de la masa de aire, la importancia de estos términos fuente sobre el conjunto del flujo es pequeña, de manera, que el error cometido por esta simplificación va a ser menor.

En el desarrollo de este TFM, se ha intentado seguir el procedimiento de simulación completo, el de la Figura 3, sin embargo, el coste computacional que conlleva no ha sido posible asumirlo con los recursos computacionales disponibles. Para poder resolver una simulación con un $CFL^2 < 1$, se requieren pasos de tiempo del orden de $1 \cdot 10^{-4} s$, esto supone que, para llegar a 10 s de simulación, son necesarios 100000 pasos de tiempo, con un tiempo requerido para las simulaciones de 48 horas.

² CFL: siglas del número de Courant-Friedrichs-Levy, es el cociente entre el paso de tiempo de la discretización temporal de nuestra simulación y el tiempo de residencia del flujo en las celdas del dominio.

4.3.2. Ecuaciones de gobierno de la fase Euleriana

Como se ha explicado en el apartado anterior, en la primera parte de la secuencia de resolución de la simulación se resuelve el flujo de aire alrededor del cuerpo hasta encontrar una solución estacionaria. El conjunto de ecuaciones de transporte a resolver es:

- Ecuación de continuidad.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (4.1)$$

- Ecuación de cantidad de movimiento.

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (4.2)$$

El tensor de esfuerzos viene dado por:

$$\tau_{ij} = \mu_t \left(2S_{ij} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (4.3)$$

Donde S_{ij} , es el tensor de deformación:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.4)$$

Dadas las restricciones temporales y de capacidad de cálculo, la fase continua se ha simulado utilizando un modelo RANS, pues en las condiciones de velocidad de los casos simulados el régimen de flujo es turbulento. El modelo utilizado es un $k - \omega$ SST. Las ecuaciones de transporte del modelo de turbulencia son, por un lado, la ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta, k :

$$\frac{\partial (\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j k) = \rho P - \rho \beta^* \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (4.6)$$

Y la ecuación de transporte para la disipación de energía turbulenta, ω :

$$\frac{\partial (\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \omega) = -\beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (4.7)$$

Donde P , es el término de producción de energía cinética turbulenta:

$$P = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (4.8)$$

Y para cerrar el modelo, la definición de viscosidad turbulenta:

$$\mu_t = \frac{\rho a_1 k}{\max(a_1 \omega, \Omega F_2)} \quad (4.9)$$

Las funciones F_1 y F_2 , son las que posibilitan que en zonas alejadas de las paredes el modelo se comporte como un modelo $k - \epsilon$, y en las regiones cercanas a las paredes como un modelo $k - \omega$. De esta forma ya no es necesario utilizar funciones de amortiguación cerca de la pared como ocurre en los modelos $k - \epsilon$. Para la resolución de este conjunto de ecuaciones se ha utilizado el solver, 'rhoPimpleFoam'. Posteriormente se describe el esquema numérico utilizado.

4.3.3. Ecuaciones de gobierno de la fase Lagrangiana

Como se ha indicado, las gotas de saliva inyectadas para simular la tos se tratan desde un punto de vista Lagrangiano. Las gotas interactúan con el flujo de aire ya resuelto a su alrededor de manera que este influye sobre ellas y determina sus trayectorias, junto con la velocidad inicial con la que entran el dominio. Para determinar la velocidad y trayectoria, se aplica la segunda ley de Newton que es resuelta para cada una de las partículas introducidas en el dominio para cada paso de tiempo. La ecuación diferencial que se resuelve sobre cada partícula (para cada componente de la velocidad) es:

$$m_d \frac{d\mathbf{u}_d}{dt} = \frac{\pi d_d^3}{6} (\rho_d - \rho) \mathbf{g} + \frac{C_d \rho \pi d_d^2}{8} |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}| \quad (4.10)$$

Donde \mathbf{u}_d , es el vector de velocidad de la partícula (gota), \mathbf{u} , es el vector de velocidad del aire alrededor de la gota. Las fuerzas que se han considerado que actúan sobre la partícula son dos, es decir, cada uno de los dos términos que aparecen a la derecha de la ecuación. El primero de ellos tiene en cuenta la influencia de los efectos de flotación sobre la gota, para ello necesita conocer la densidad tanto de la gota (ρ_d), como del aire que la rodea (ρ), ambos son inputs al modelo. d_d , representa el diámetro de la partícula. Como veremos más adelante, debido a los efectos de la evaporación, este diámetro evoluciona también para cada iteración, de ahí que junto con la ecuación (4.10) sea necesario también calcular el balance energético y de pérdida de masa de cada gota.

El segundo término que aparece a la derecha de la ecuación (4.10) se incluye para poder considerar el efecto de arrastre del flujo principal. Este término es el que finalmente determina como el flujo de aire ya resuelto termina influyendo sobre la gota de saliva. C_d es el coeficiente de arrastre y se determina mediante la siguiente correlación:

$$C_d = \max \left\{ \frac{24}{Re_d} (1 + 0.15 Re_d^{0.687}); 0.44 \right\} \quad (4.11)$$

Donde Re_d , es el número de la gota y se calcula como:

$$Re_d = \frac{d_d \rho |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}|}{\mu} \quad (4.12)$$

A medida que la gota es inyectada en el dominio, comienza su proceso de evaporación. Este proceso se debe a la diferencia de concentración de agua, entre la gota (que se ha asumido 100% agua) y el aire húmedo que la rodea, cuya concentración es dependiente de la humedad relativa considerada. Es este gradiente de concentraciones el que determina la evaporación, y depende a su vez de la temperatura de gota. Por lo tanto, es necesario, al igual que ocurre con las fuerzas que aplican sobre la gota, realizar un balance energético sobre cada partícula. En este caso la ecuación de conservación de energía en la gota quedaría como:

$$m_d C_{p,d} \frac{dT_d}{dt} = h \pi d_d^2 (T - T_d) + \frac{dm_d}{dt} h_{fg} \quad (4.13)$$

Por tanto, la variación de energía de la gota, que vendría determinada por el producto de su calor específico ($C_{p,d}$) por el gradiente temporal de su temperatura $\frac{dT_d}{dt}$, es debida a los dos efectos considerados en la parte derecha de la ecuación. El primer término se refiere a la transferencia de calor por convección con el aire que rodea la gota, en donde el coeficiente convectivo se calcula en función de la correlación de Ranz-Marshall:

$$Nu = \frac{h d_p}{k_t} = 2 + 0.6 Re_d^{0.5} Pr^{0.33}, Pr = \frac{\mu}{\rho \alpha} \quad (4.14)$$

Donde las propiedades de μ, ρ, α , y k_t , hacen referencia a las propiedades físicas del aire que rodea a la gota, siendo k_t la conductividad térmica (se incluye el subíndice t , para no confundirlo con el término de difusión de masa).

El segundo término de la derecha de la ecuación (4.13), es la contribución a la energía del fenómeno de evaporación. Esto es el producto del calor latente de evaporación del agua que

forma la gota (h_{fg}), por la tasa de evaporación de la gota. La siguiente ecuación (4.15) muestra como se ha modelado este término. Esta ecuación tiene mucha importancia en nuestro modelo, pues determina el cambio de diámetro de las gotas y, por tanto, también influye sobre el cálculo de su trayectoria. Como se ha podido comprobar el diámetro de la partícula está presente en los dos términos de fuerzas que se han considerado en la ecuación (4.10).

$$\frac{dm_d}{dt} = \pi d_p^2 M_{wl} k_{mt} \left(\frac{p_{sat}}{RT_d} - X \frac{p}{RT} \right) \quad (4.15)$$

Es decir, la evaporación es directamente proporcional al gradiente de concentración entre el aire saturado en vapor de agua que rodea la superficie de la gota, cuya concentración se calcula como: $\frac{p_{sat}}{RT_d}$, y la concentración de vapor de agua en el aire alejado de la gota $X \frac{p}{RT}$, donde X, es la fracción volumétrica de vapor de agua en el aire. k_{mt} , es un coeficiente de transferencia de masa, que se calcula en función de la correlación del número de Sherwood de Ranz-Marshall, ecuación (4.16). M_{wl} , es el peso molecular de la composición de la gota, en nuestro caso se trata del peso molecular del agua, y es el que permite transformar de kmol/s a kg/s.

$$Sh = \frac{k_{mt} d_d}{D} = 2 + 0.6 Re_d^{0.5} Sc^{0.33}, Sc = \frac{\mu}{\rho D} \quad (4.16)$$

Donde D , es la difusividad del agua en aire y Sc , es el número de Schmidt.

Es importante indicar que dentro del modelo Lagrangiano se ha incluido la modelización de la dispersión turbulenta. Dado que el modelo utilizado para la resolución de flujo que rodea las partículas es un modelo RANS, su resolución proporciona como resultado un campo de velocidades medio. De ahí que, para tener en cuenta el intercambio de cantidad de movimiento entre las gotas y las escalas inferiores a las del flujo medio, se han desarrollado diversos modelos que tratan, desde un punto de vista estadístico, introducir de manera artificial lo que llamamos dispersión turbulenta, que no es más que la interacción de las gotas con aquellos torbellinos que el modelo RANS ha terminado integrando.

Para incorporar este efecto, se tiene que calcular una *velocidad fluctuante*, que será añadida a la componente media de la velocidad que rodea la partícula; y además una *escala de tiempo*. Esta escala de tiempo será el mínimo entre el tiempo que sobrevive un vórtice ('eddy lifetime') y el tiempo que tarde la partícula en cruzar el torbellino, de tal manera que cuando se

sobrepasa este periodo se tiene que generar un nuevo valor de velocidad fluctuante. El tiempo de supervivencia de un torbellino es función de la escala de disipación turbulenta ($t \sim (k/\varepsilon)$).

La componente fluctuante se calcula asumiendo que sigue una función de densidad de probabilidad normal, cuya media está centrada en cero y la desviación estándar es igual a $\sqrt{\frac{2k}{3}}$.

Es decir que la velocidad fluctuante tomará un valor aleatorio siguiendo dicha función de probabilidad, en donde a mayor energía cinética turbulenta, más probable será que la componente fluctuante sea más alta.

En las simulaciones se ha utilizado el submodelo de *openFOAM*, 'StochasticDispersionRAS', que realiza las funciones que se acaban de describir, de manera que la velocidad que se utilizará en la ecuación (4.10) es:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (4.17)$$

Como apunte final dentro de la definición de la modelización del comportamiento de las gotas, se han asumido las siguientes hipótesis:

- Las partículas no interaccionan entre ellas. No se ha incluido ningún modelo para definir como se comportarían si hubiera colisiones entre ellas. Esta hipótesis no tendrá mucho impacto pues el grado de dispersión de partículas es muy grande.
- El submodelo utilizado para la interacción de las partículas con las paredes del modelo asume que, una vez que la trayectoria de la partícula alcanza una pared, esta queda fijada en dicha posición, ('stick'), es decir, no rebota. El algoritmo de cálculo, cuando una partícula queda fija en la pared, cambia su categoría de 'activa' a 'no activa'. Este parámetro será importante a la hora del postprocesado porque nos dará una idea del número de partículas que han alcanzado alguna pared.

La resolución de este conjunto de ecuaciones está implementada en el solver 'reactingParcelFoam' sobre el que se han realizado algunas modificaciones para representar el modelo matemático aquí descrito. En los siguientes apartados se describe el esquema numérico utilizado.

4.4. ESQUEMA NUMÉRICO

El procedimiento de resolución del problema seguido ha sido el que viene descrito en el flujograma de la Figura 4. Por tanto, en primer lugar, se ha realizado una simulación para el obtener el campo de velocidades, presiones y temperatura sobre el dominio discretizado.

Para ello se ha utilizado el solver de *openFOAM* 'rhoPimpleFoam'. Este solver permite simular flujo compresible y transitorio. Aunque ciertamente en nuestro caso los fenómenos de compresibilidad van a ser pequeños, se optó por esta opción para tener en cuenta las variaciones de densidad.

Como indica el propio nombre del solver, el algoritmo utilizado para resolver el acoplamiento entre las ecuaciones de cantidad de movimiento y la de continuidad, es el PIMPLE. Este algoritmo es una combinación de los algoritmos SIMPLE y PISO. Para el problema que nos ocupa, nos interesa la solución estacionaria, por esto en un primer momento se ha barajado utilizar un algoritmo SIMPLE. Sin embargo, dado que la malla no es estructurada, y en ciertas regiones puede ser no suficientemente refinada, se ha optado por elegir el algoritmo PIMPLE, pues ofrece ciertas ventajas de estabilidad numérica.

PIMPLE permite seguir utilizando pasos de tiempo con $CFL \gg 1$, sin embargo, a diferencia del algoritmo SIMPLE en cada iteración permite realizar tantas correcciones de las ecuaciones de cantidad movimiento como se defina (*OuterCorrections*). En el siguiente flujograma se muestra el funcionamiento de este algoritmo.

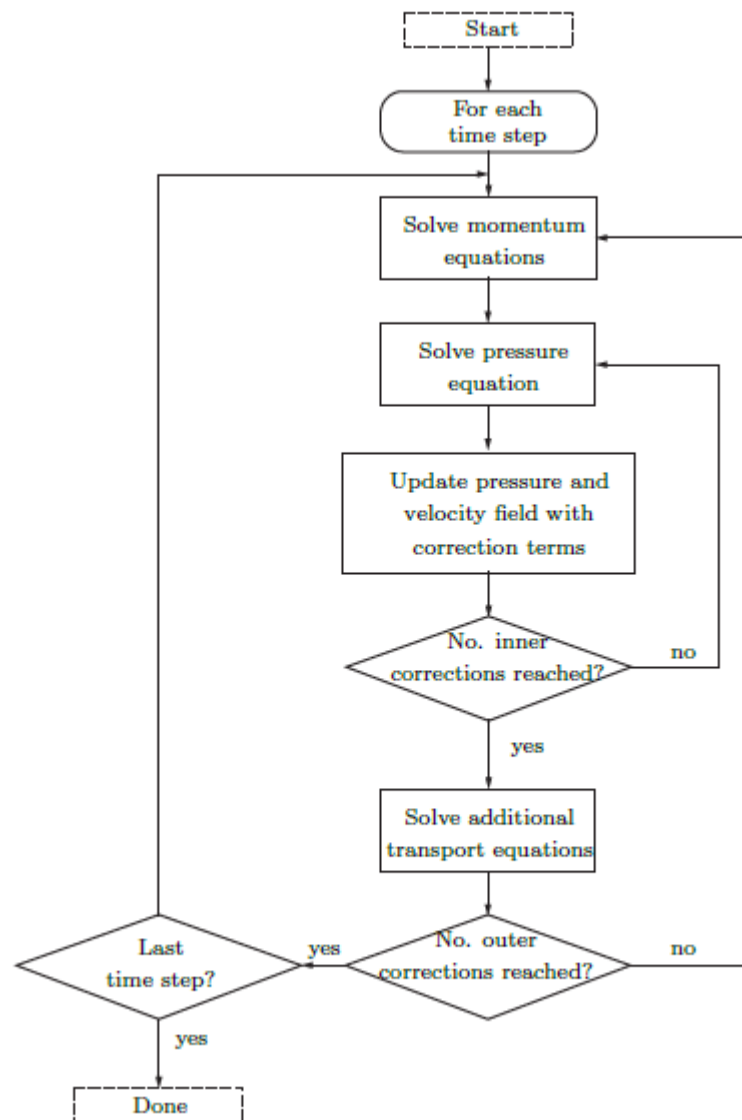


Figura 5: Flujograma simplificado del algoritmo PIMPLE. Referencia: (Merkel, 2019).

Los esquemas de discretización utilizados para cada uno de los términos de las ecuaciones de transporte a resolver definidos son del tipo ‘upwind’ de segundo orden para las derivadas espaciales, y un ‘Euler’ de primer orden para las derivadas temporales.

La segunda parte del procedimiento de simulación consiste en importar la solución obtenida para poder utilizar un nuevo solver, ‘reactingParcelFoam’, encargado de calcular las trayectorias de las partículas inyectadas en el modelo.

Dado que estamos utilizando el procedimiento simplificado de simulación (Figura 4), se ha modificado el algoritmo original del solver, de manera que ya no se recalcula en cada paso de tiempo el flujo de la fase Euleriana.

El algoritmo, dados los campos de velocidad, presión, temperatura y fracciones másicas (aire y agua) del flujo de aire, resuelve en cada paso de tiempo y para cada partícula el set de ecuaciones diferenciales de primer orden presentadas anteriormente: balance de cantidad de movimiento (10) y energía (13). Es decir, se trata de un problema de valor inicial, a resolver para cada gota introducida en el modelo, y para cada ecuación a resolver. Para ello se ha utilizado como procedimiento de integración numérica el método de Euler.

4.4.1. Desarrollo de la malla. Estudio de sensibilidad

Debido a la posición del volumen ocupado por la persona en el centro de la geometría es complicado poder realizar una malla estructurada. Por ello se ha optado por una malla tridimensional no estructurada. Hay que tener en cuenta que, dadas las dimensiones del dominio computacional, a poco que se refine la malla el número de celdas aumenta de manera muy acusada.

Se han generado tres mallas diferentes. Para visualizar el resultado de estas en las siguientes figuras se muestra la superficie que correspondería al suelo con la distribución de celdas. En las dos primeras se ha intentado refinar las paredes cercanas a las entradas y salidas, pero manteniendo en cierta medida el tamaño en el resto del dominio computacional. En la última de ellas, se ha intentado refinar todo lo posible alrededor del objeto que representa la persona, manteniendo en la medida de lo posible el tamaño de la malla. Los objetivos de este refinamiento han sido:

- Proveer al modelo de una malla lo suficientemente fina alrededor de la persona, de manera que el modelo de turbulencia usado sea capaz de resolver de manera adecuada los fenómenos de capa límite.

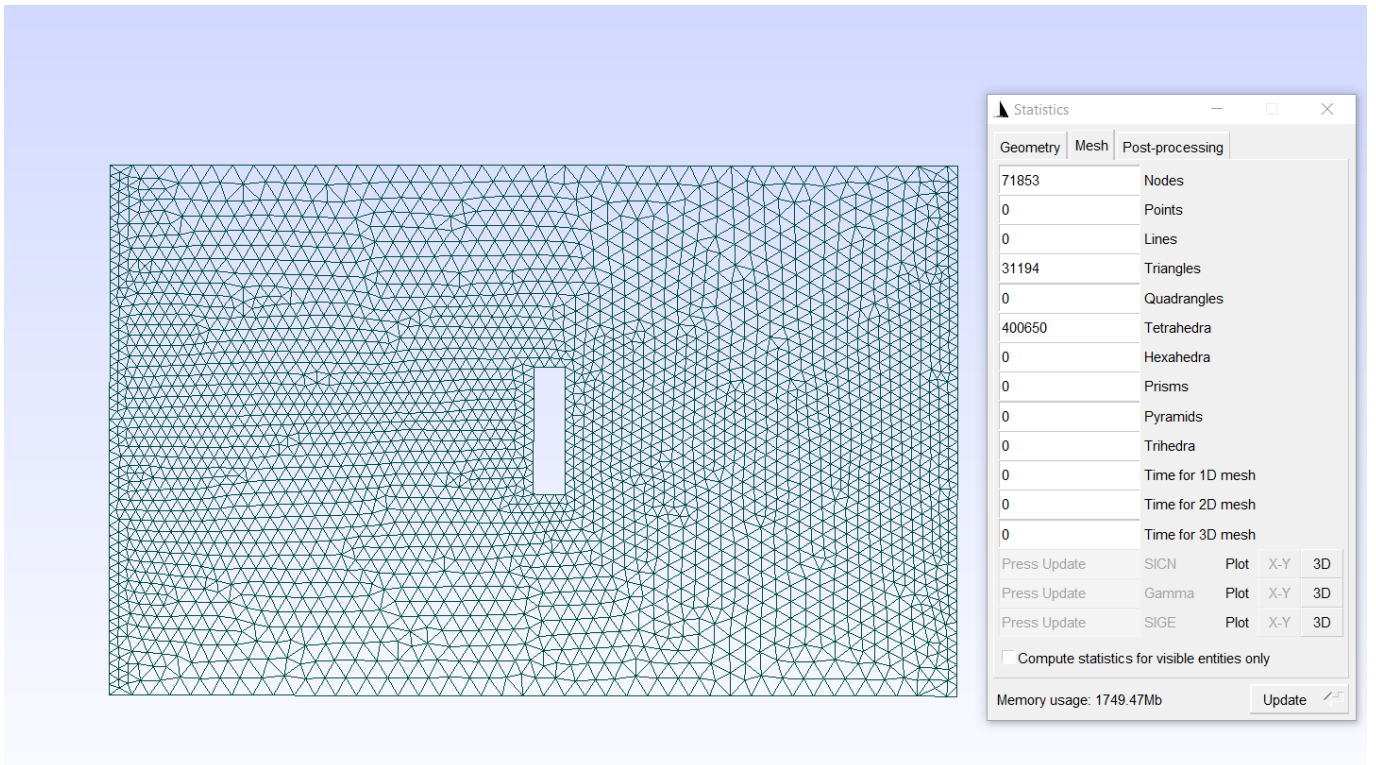


Figura 6. Malla basta. (Malla 1). Superficie correspondiente al suelo.

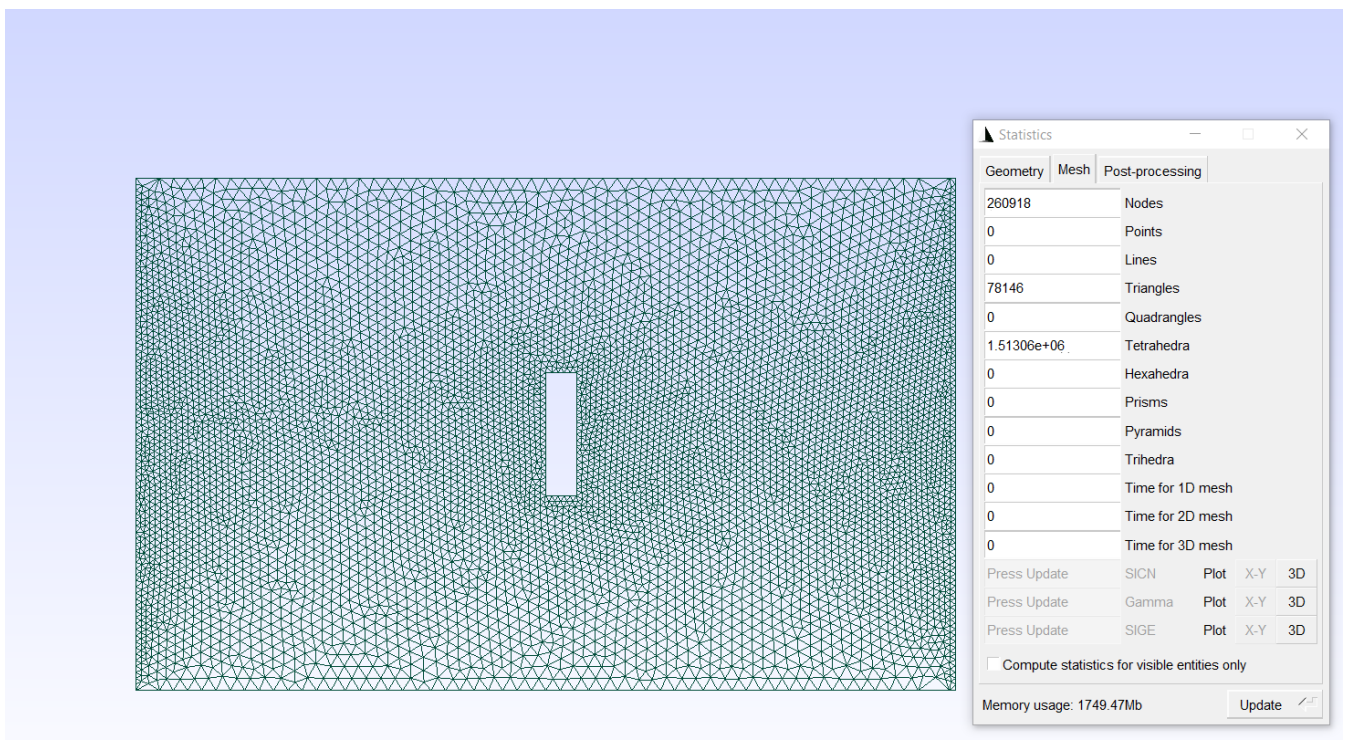


Figura 7. Malla refinada. (Malla 2). Superficie correspondiente al suelo.

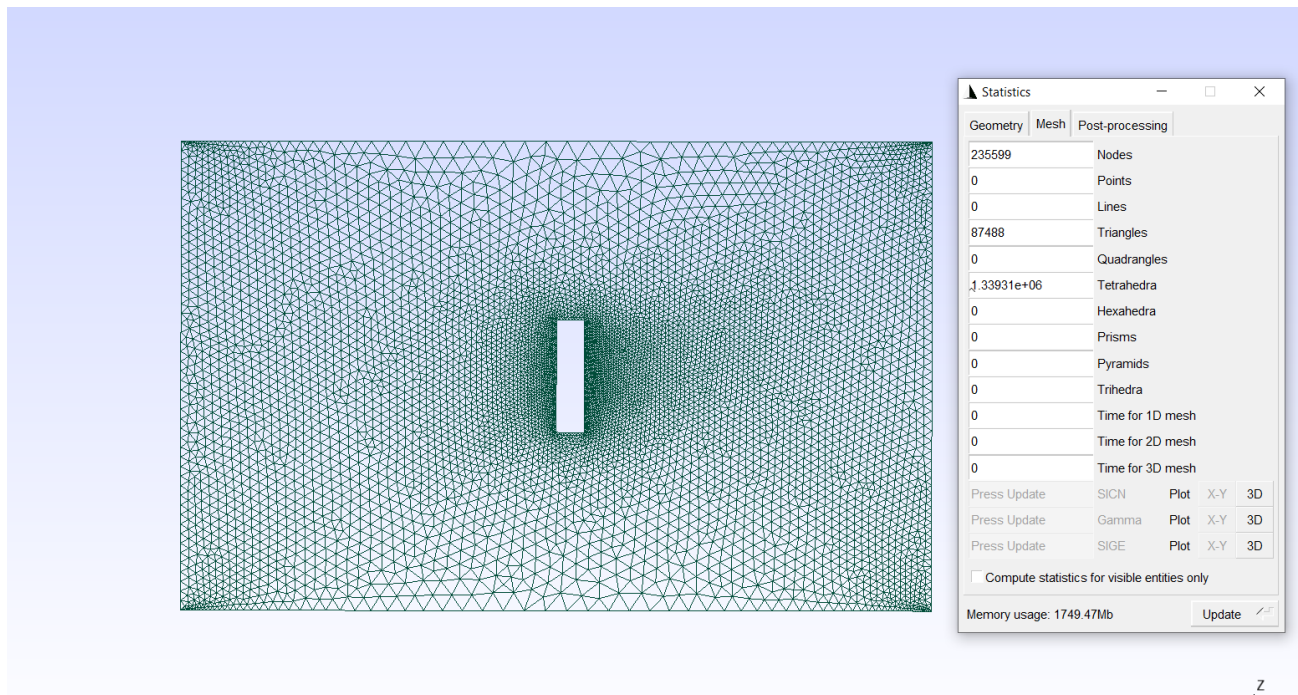


Figura 8. Malla refinada alrededor del cuerpo. (Malla 3). Superficie correspondiente al suelo.

- Dado que estamos interesados principalmente en las trayectorias que describen las gotas de saliva debido a las características del flujo, que predominará en la dirección X del dominio, las partículas viajarán por el centro y alrededor del punto de emisión, esto es, la boca de la persona. De ahí que también sea muy interesante mantener la malla refinada en esa zona, para resolver con mayor exactitud las trayectorias.

Para poder comparar los resultados de las tres mallas, se ha simulado uno de los casos del flujo desde la ventana hacia la puerta, con una velocidad de 2 m/s, la misma velocidad que la planteada en los escenarios que se ha simulado posteriormente para la resolución de las trayectorias de partículas. Se han seleccionado dos líneas en un plano central, $Y=1.25$, para representar la velocidad en el eje X para cada una de las mallas. En la Figura 9 se muestra la localización de estas líneas en el modelo.

Al comparar los resultados, Figura 10 y Figura 11, se observa como las mallas 2 y 3 ofrecen valores muy parecidos. La malla 1, especialmente para el caso de $X=1.7m$, muestra resultados alejados de las otras dos. A la vista de los resultados se podría elegir cualquiera de las mallas 2 y 3. Sin embargo, la malla 3 ofrece ventajas adicionales desde el punto de vista la resolución

del flujo alrededor de la persona, ofreciendo valores de y^+ que muestran suficiente refinamiento en la pared para resolver el flujo turbulento.

Algo que también se puede observar al revisar las mallas, es que en las paredes laterales que delimitan el dominio, la densidad de celdas no es suficiente en cualquiera de los casos para resolver bien la capa límite en esas zonas. Aunque esto va a provocar que la solución del flujo cercano a esas paredes no sea muy precisa, también es cierto que esas regiones del flujo no son de especial interés para el problema que se pretende resolver. Como se podrá comprobar en el apartado de resultados, dado que la emisión de gotas ocurre en el centro del dominio computacional, y el flujo de entrada es paralelo al eje X, lo más probable es que las gotas se muevan en el entorno del volumen ocupado por la persona, y alejadas de las paredes laterales del dominio.

Finalmente, la malla elegida para resolver los escenarios planteados en el apartado 6 es la Malla 3, que está compuesta por $1.34 \cdot 10^6$ celdas.

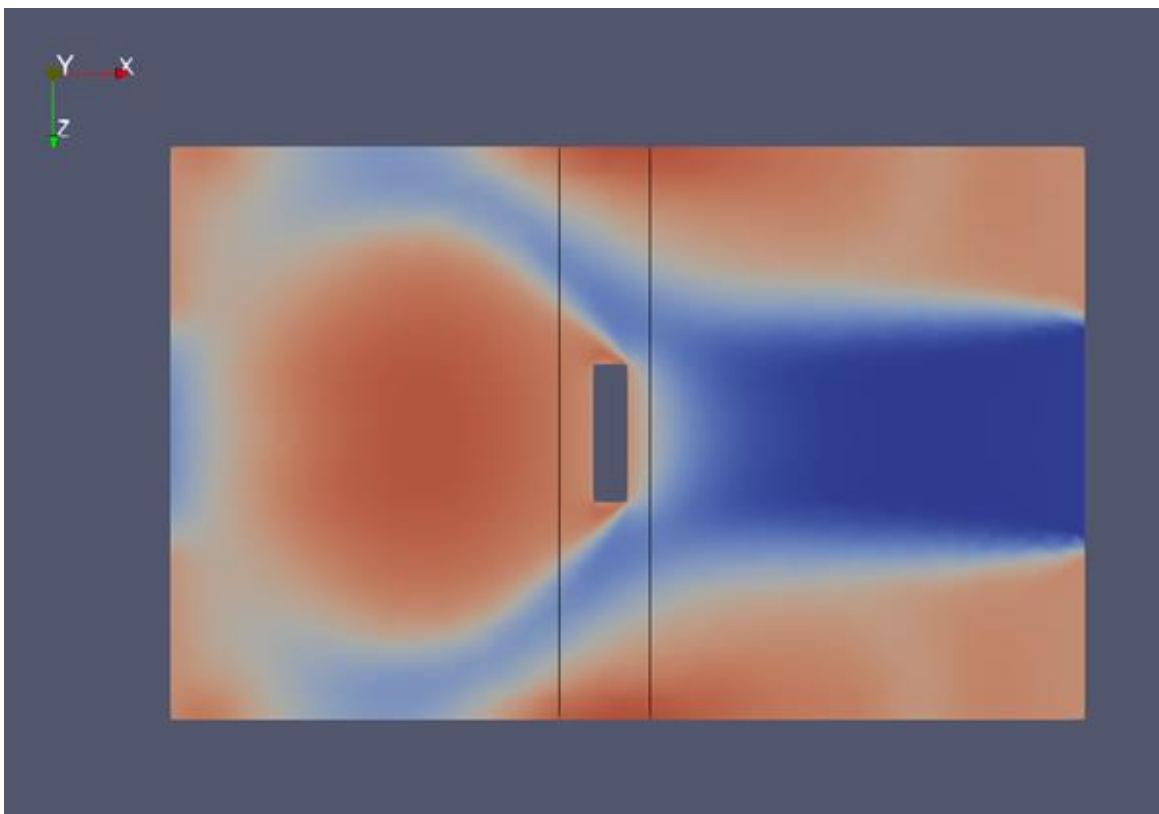


Figura 9. Localización de las líneas para representar perfiles de velocidad. Plano Y=1.25m.

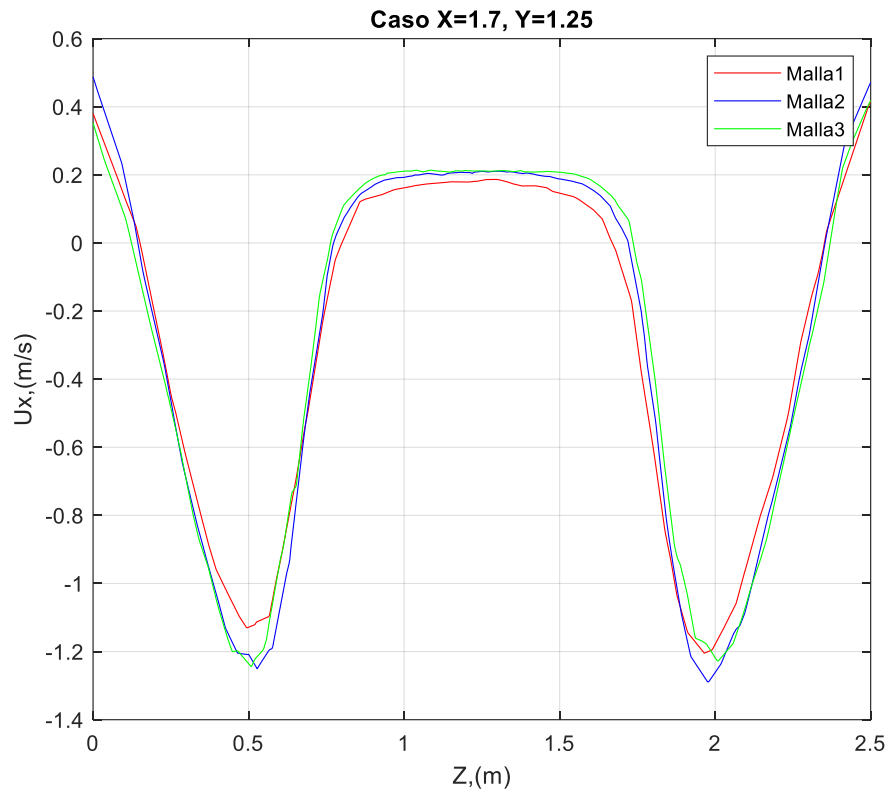


Figura 10. Comparativa del perfil de velocidad U, a lo largo de Z, para X=1.7m, Y=1.25m.

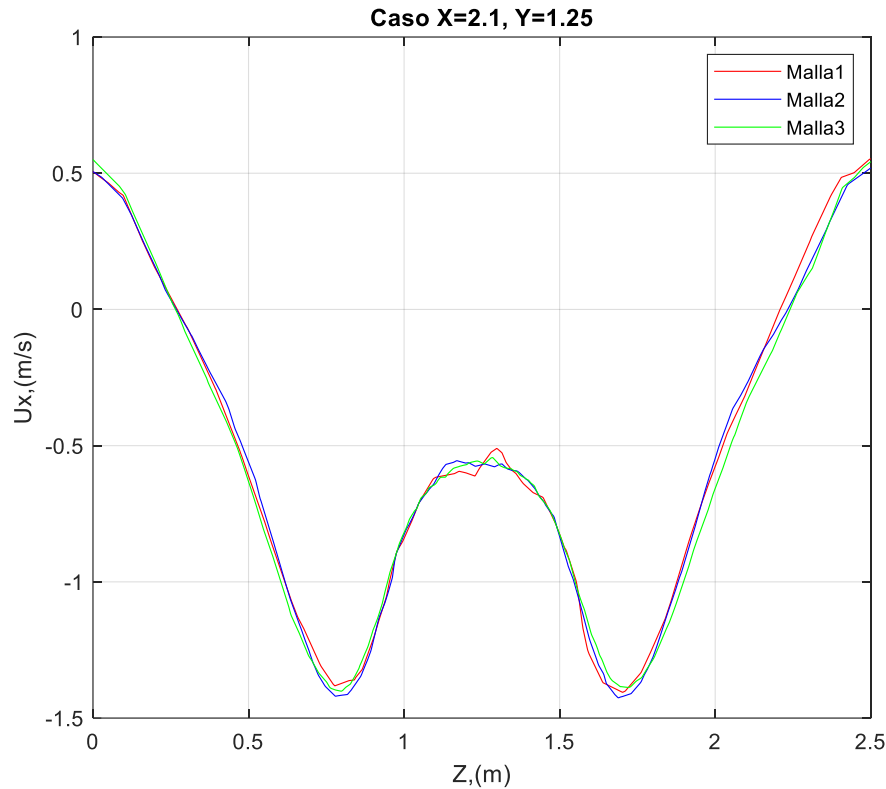


Figura 11. Comparativa del perfil de velocidad U , a lo largo de Z , para $X=2.1$ m, $Y=1.25$ m.

5. Validación modelo de evaporación

Como se ha adelantado en la revisión bibliográfica uno de los aspectos clave para comprender la distribución de las partículas es poder describir con suficiente precisión la evolución de su diámetro, pues dependiendo de su tamaño podrían quedar suspendidas en el aire durante mayor tiempo y, por lo tanto, suponer un riesgo mayor para la salud.

Para comprobar si el modelo matemático que describe la evaporación de las gotas presentado anteriormente es aceptable, se ha desarrollado una geometría simplificada. Esta geometría simplificada consiste en un cilindro de dimensiones: $D=75$ mm y $L=120$ mm, mallado de manera uniforme utilizando 6840 celdas. Este modelo pretende reproducir los ensayos experimentales llevados cabo por (Basu et al., 2020), donde se utiliza un levitador acústico para suspender una gota y analizar mediante imagen como evoluciona el tamaño de una gota (con agua pura y con sal al 1%).

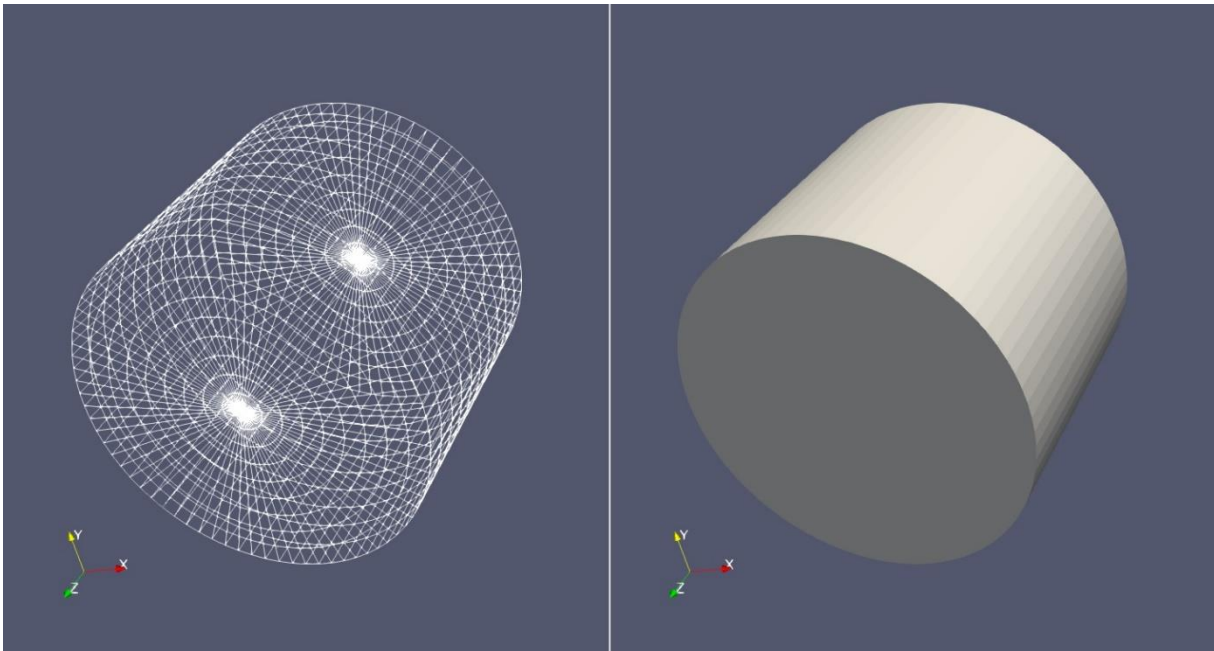


Figura 12. Geometría y malla utilizada para la validación.

Para reproducir los resultados experimentales se ha posicionado una gota en el centro del dominio, y se ha considerado un ambiente sin velocidad, de manera que el único efecto que determina la evolución del tamaño de la gota es la propia evaporación del agua a consecuencia de la diferencia de concentración con el aire que la rodea.

Las condiciones de contorno consideradas para esta simulación de validación han sido las mismas que las utilizadas en el ensayo experimental, esto es:

- Temperatura ambiente: 28 °C
- Humedad relativa: 41 %
- Diámetro inicial de la gota: 550 μm
- Composición de la gota: 100 % agua.

En la Figura 13 se muestra la comparativa entre los resultados experimentales y los resultados numéricos. Por una parte, lo que se aprecia de forma clara es que tanto los resultados experimentales como los resultados numéricos siguen una tendencia del tipo $t \propto d^2$, ajustándose de manera cercana en los primeros pasos de tiempo. A medida que avanza el tiempo los resultados experimentales tienden a separarse algo más de la solución numérica.

Entre las posibles fuentes de incertidumbre que pueden provocar esta separación está la propia variación de las condiciones experimentales durante el ensayo, entre ellas, la que tiene un efecto más relevante es la humedad relativa. Para visualizar este efecto, y dado que

durante el ensayo la humedad relativa se movió entre 41 % \pm 2 %, se ha procedido a simular también los extremos del intervalo. Así se puede apreciar como a medida que pasa el tiempo estas pequeñas variaciones tienen un peso importante. Desde el punto de vista numérico hay que tener en cuenta que el error se irá arrastrando y ampliando, pues se parte del diámetro de la iteración anterior.

Por tanto, estas incertidumbres propias del ensayo experimental de referencia, junto con el error propiamente dicho del modelo matemático, pueden explicar esta separación, aunque como conclusión se puede decir que el modelo de evaporación logra reproducir la tendencia, y además es bastante fiable sobre todo en los primeros pasos de tiempo.

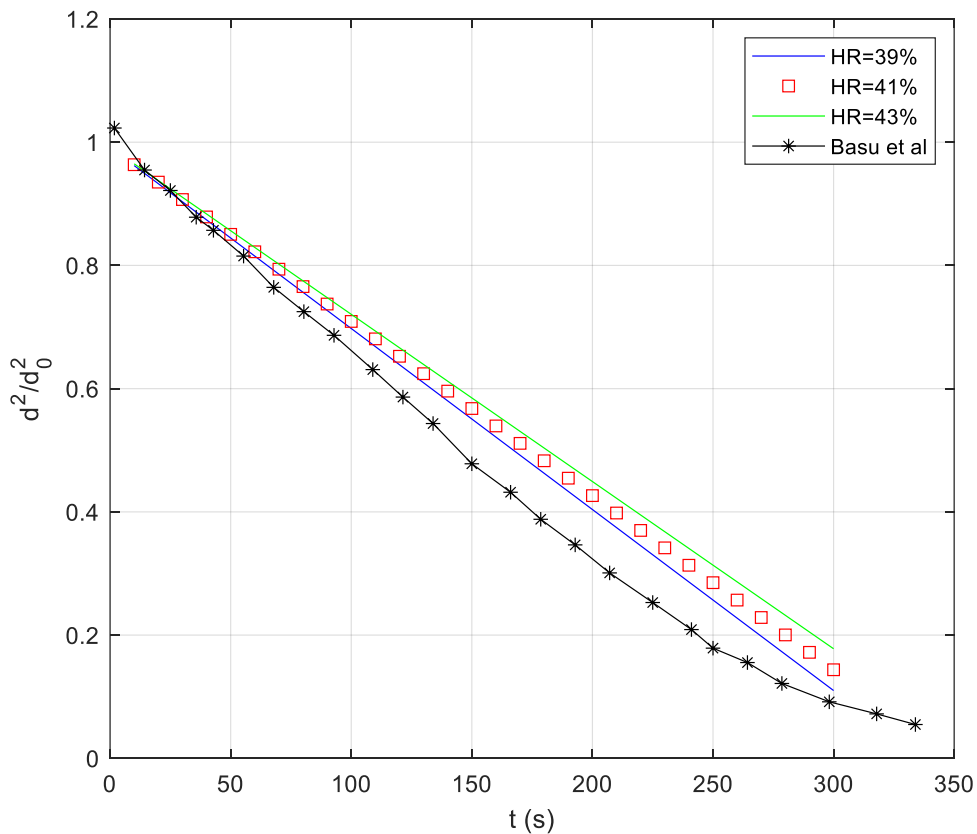


Figura 13. Comparativa entre resultados experimentales (Basu et al.) y simulación numérica para validación del modelo de evaporación.

6. Casos simulados. Condiciones iniciales y de contorno.

El escenario simulado representa la inyección de gotas de saliva que se produce en el momento en el que una persona tose. Una vez estas gotas entran con una determinada velocidad en el dominio computacional, se distribuirán en función del campo de velocidad impuesto por el flujo de aire calculado alrededor el objeto que representa la persona.

6.1. MODELO DE INYECCIÓN DE PARTÍCULAS

Se deben definir en primer lugar las características de la inyección de gotas que se produce al toser. Para ello se han tomado como referencia los trabajos citados en la revisión bibliográfica. En la Tabla 1 se describen los inputs para el modelo de inyección utilizados.

Tabla 1. Parámetros del modelo de inyección para el caso de tos.

Parámetro	Unidades	Caso: tos
Tiempo de inyección	(s)	0.1
Masa total inyectada	(mg)	24.6
Número de partículas inyectadas	(#)	1900
Diámetro de gota	(μm)	(*)
Diámetro mínimo de gota	(μm)	1
Diámetro máximo de gota	(μm)	2000
Velocidad	(m/s)	11.7
Temperatura	($^{\circ}\text{C}$)	35
'Patch' de inyección	(--)	MOUTH ³
Tiempo hasta inyección	(s)	0.1

³ Nombre de la superficie que representa la boca utilizada en las simulaciones con openFOAM.

En cuanto al tamaño de gota, en lugar de simular un único tamaño para toda la inyección, se ha utilizado una distribución Weibull (también denominada Rosin-Ramler) que permite definir una cierta distribución de gotas. Esta distribución ha sido probada como una de las que mejor representa la distribución de tamaño de gota medido experimentalmente durante los procesos de tos o estornudo. Para los casos que aquí se presentan la distribución se ha definido con un parámetro de escala de $80 \mu\text{m}$, y un parámetro de forma de 8 (Xie et al., 2009). OpenFOAM incorpora diferentes submodelos para definir la inyección de partículas, para este caso se ha optado por el modelo *'patchInjection'*. Esta opción permite definir una superficie del dominio como la fuente de partículas, distribuyendo de manera aleatoria sobre la misma el punto de entrada de cada partícula. En nuestro caso, se ha definido una superficie que representa la boca de la persona (Figura 2), y desde ahí es donde salen expelidas las gotas de saliva, con una determinada velocidad inicial.

Se ha asumido que las gotas están compuestas al 100 % por agua. Como se ha descrito en la revisión bibliográfica, las gotas de saliva contienen una cierta cantidad de otras sustancias (mucosidad, enzimas, células epiteliales, ...), que comúnmente se modelan como un cierto porcentaje de sal. La consecuencia de esto es que la gota no termina desapareciendo al evaporarse toda el agua, sino que queda un residuo (*'droplet nuclei'*) en forma de cristal de pequeño tamaño que puede quedar suspendido en el aire largo tiempo. En el modelo aquí utilizado ese comportamiento no está representado, la gota puede evaporarse por completo si el tiempo de simulación es lo suficientemente largo.

En cuanto a la temperatura inicial de la gota se ha asumido que es la misma temperatura que la del cuerpo humano en condiciones normales ($\sim 35 \text{ }^\circ\text{C}$). Conforme avanza la simulación, la temperatura de la gota se va recalculando al resolver la ecuación (4.13), hasta alcanzar una determinada temperatura de equilibrio.

Las condiciones que definen la inyección de partículas en el modelo se han mantenido constantes en cada uno de los escenarios calculados. Los inputs son parte del fichero *'reactingCloud1Properties'* incluido en cada caso. En este fichero además se fijan los submodelos para transferencia de calor, evaporación, dispersión turbulenta y demás parámetros relativos al esquema Lagrangiano.

6.2.CONDICIONES DE CONTORNO. CASOS PLANTEADOS

Como ya se ha introducido en primer lugar se va a obtener la solución estacionaria del flujo alrededor de la persona, a partir de la cual se calcularán las trayectorias de las gotas que se introduzcan en el dominio.

Las condiciones de contorno en las superficies que representan las paredes de la habitación han sido definidas como tipo 'wall', es decir, condición de no deslizamiento, con la excepción de las entradas y salidas de aire, como lo son las superficies que representan la puerta y la ventana. La superficie que se asemeja al cuerpo de la persona también se ha tomado como tipo pared.

Por el tipo de solver utilizado, debemos de definir condiciones de contorno e iniciales para la velocidad, presión y temperatura, además de las variables de transporte propias de modelo de turbulencia (viscosidad turbulenta, energía cinética turbulenta y tasa de disipación turbulenta).

En la Tabla 2 se muestran las principales condiciones de contorno para cada superficie del modelo. Se han definido dos posibles casos de flujo, uno desde la ventana hacia la puerta, y otro en dirección contraria, desde la puerta hacia la ventana. En ambos casos la velocidad es la misma, 2 m/s, y representa una brisa ligera, siguiendo la escala de viento de Beaufort (Barua, 2005). La entrada en ambos casos es paralela al eje X, perpendicular al plano de ventana y puerta.

Además de las condiciones de flujo, se han simulado dos condiciones ambientales diferentes, un clima seco, con una temperatura de 20 °C y una humedad relativa del 50 %. Y por otro lado un clima húmedo y frío, con una temperatura de 10 °C y una humedad relativa del 90 %. Lo que se va buscando al simular estas dos condiciones ambientales es determinar cómo afectará esta diferencia a las trayectorias de las gotas. Sabemos que, ante climas más húmedos, el motor de la evaporación, es decir, la diferencia de concentración de vapor de agua entre gota y ambiente será menor, y por lo tanto será esperable que el tamaño de gota no se reduzca tanto, por lo que los efectos del peso estén más presentes.

Para fijar la humedad relativa se tienen que definir la concentración de agua y aire. Estas concentraciones se introducen como input al modelo, una vez importada la solución de flujo

estacionario. Es decir, estas concentraciones iniciales (y en definitiva la humedad relativa) estarán uniformemente distribuidas, pues como se ha explicado anteriormente, el solver que calcula las trayectorias ('reactingParcelFoam') no actualiza la solución del flujo de aire húmedo.

Tabla 2. Condiciones de contorno para los casos simulados.

Superficie	Velocidad (m/s)	Presión (Pa)	Temperatura (K)
DOOR	(Ver Tabla)	(Ver Tabla)	(Ver Tabla)
WINDOW	(Ver Tabla)	(Ver Tabla)	(Ver Tabla)
X0_WALL	U=0	$\nabla p=0$	$\nabla T=0$
XN_WALL	U=0	$\nabla p=0$	$\nabla T=0$
Z0_WALL	U=0	$\nabla p=0$	$\nabla T=0$
ZN_WALL	U=0	$\nabla p=0$	$\nabla T=0$
FLOOR	U=0	$\nabla p=0$	$\nabla T=0$
ROOF	U=0	$\nabla p=0$	$\nabla T=0$
BODY	U=0	$\nabla p=0$	$\nabla T=0$
MOUTH	U=0	$\nabla p=0$	$\nabla T=0$

Por último, se incluye una tabla con el resumen de los casos simulados y las condiciones de cada uno.

Tabla 3. Resumen de casos simulados

Escenario	Superficie	Velocidad (m/s)	Presión (Pa)	Temperatura (K)	Humedad (%)
Caso 1	WINDOW	(-2,0,0)	$\nabla p=0$	293	HR(50%)
	DOOR	$\nabla U=0$	$p=100000$	293	$Y_{agua}=0.00721$ $Y_{aire}=0.99279$
Caso 2	WINDOW	$\nabla U=0$	$p=100000$	293	HR(50%)
	DOOR	(2,0,0)	$\nabla p=0$	293	$Y_{agua}=0.00721$ $Y_{aire}=0.99279$
Caso 3	WINDOW	(-2,0,0)	$\nabla p=0$	283	HR(90%)
	DOOR	$\nabla U=0$	$p=100000$	283	$Y_{agua}=0.00681$ $Y_{aire}=0.99319$
Caso 4	WINDOW	$\nabla U=0$	$p=100000$	283	HR(90%)
	DOOR	(2,0,0)	$\nabla p=0$	283	$Y_{agua}=0.00681$ $Y_{aire}=0.99319$

7. Discusión de resultados.

7.1. ESTRUCTURA DEL FLUJO ALREDEDOR DE LA PERSONA

En los casos planteados se han fijados dos tipos de flujo, uno desde la ventana hacia la puerta (WtD) y otro desde a puerta hacia la ventana (DtW). En ambos casos se ha utilizado la misma magnitud de velocidad, 2 m/s, y la misma dirección en la entrada, paralelo al eje X, lo único que cambia es el sentido.

Aunque el problema pudiera parecer simétrico con respecto al eje X, por estar la persona situada en el centro del habitáculo, el hecho de que puerta tenga una superficie mayor a la de la ventana, hace que las características del flujo sean algo diferentes.

Para visualizar las estructuras del flujo, se han representado los vectores de velocidad en dos planos, $Z=1.25$ m e $Y=1.25$ m. En la Figura 14, se representan la localización de estos planos.

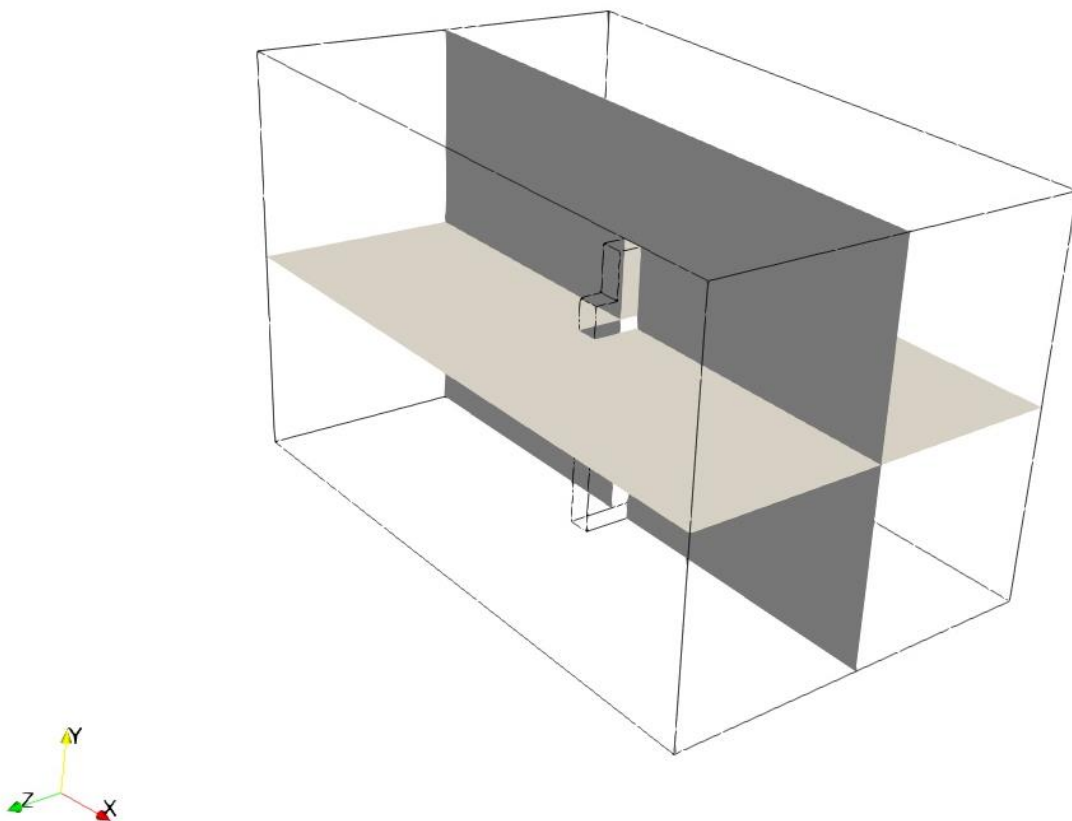


Figura 14. Localización de los planos de visualización del flujo en la habitación.

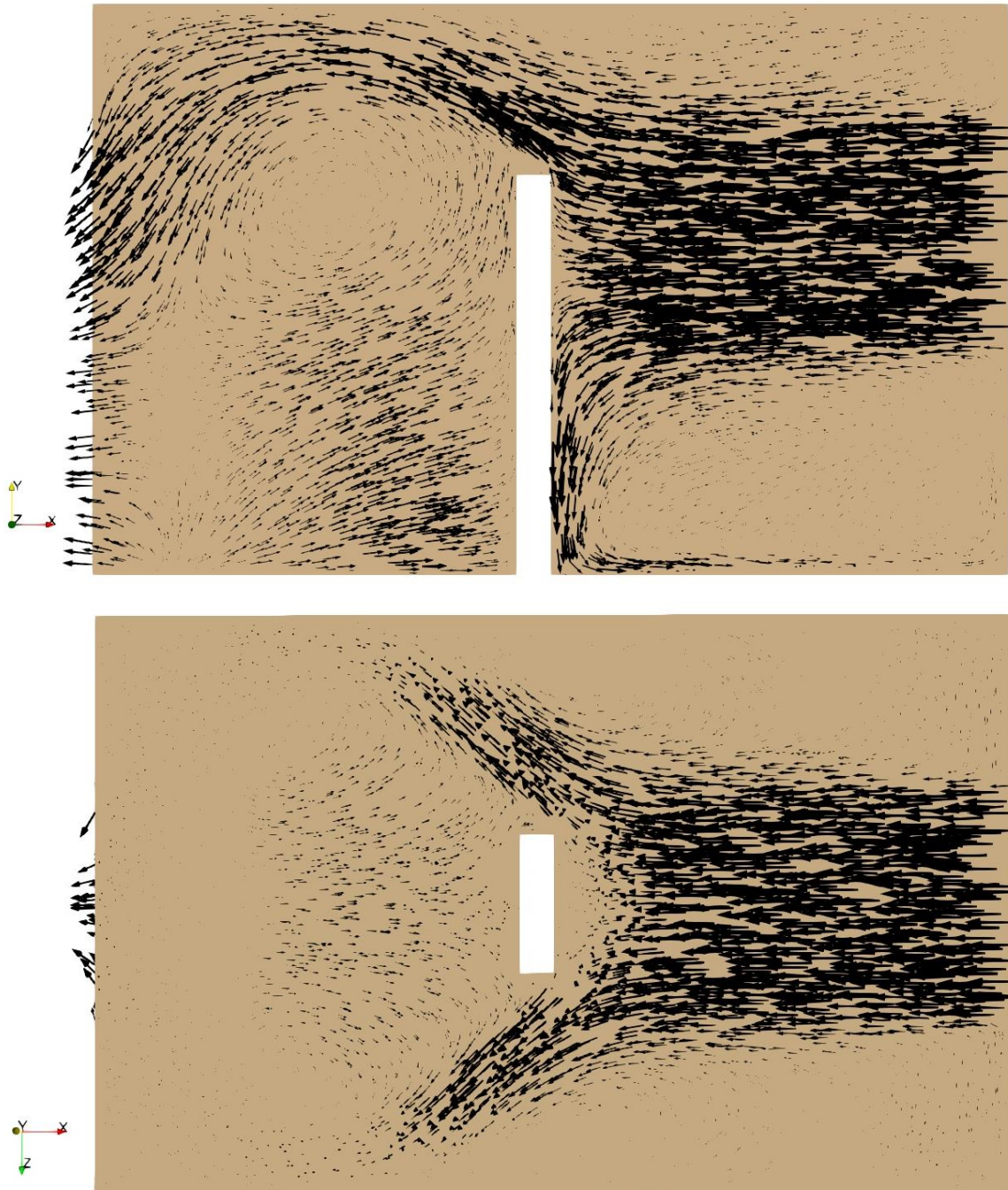


Figura 15. Campo de velocidades. Plano Z=1.25m (arriba). Plano X=1.25m (abajo). Caso: WtD (T=20°C)

El flujo entra desde la ventana, paralelo al eje x y se encuentra de frente con el obstáculo (persona), lo rodea creando tras de sí una estructura donde se recircula el flujo y que por lo tanto puede ser una zona de remanso para las gotas inyectadas. Para visualizar mejor las estructuras vorticales generadas se ha calculado el parámetro Λ_2 . Esta es una definición

de vórtice capaz de detectar los centros de los vórtices para bajos números de Reynolds, como es el caso (Jeong & Hussain, 1995).

En la Figura 16 se ha representado los isocontornos de este parámetro para la región situada detrás de la persona, para un valor igual a 2.8. Se puede identificar la estructura que ya se intuía al observar los vectores de velocidad. Es de esperar que, si alguna gota llegara a esta región, su tiempo de residencia aumentará pues podría quedar atrapada dentro de la recirculación.

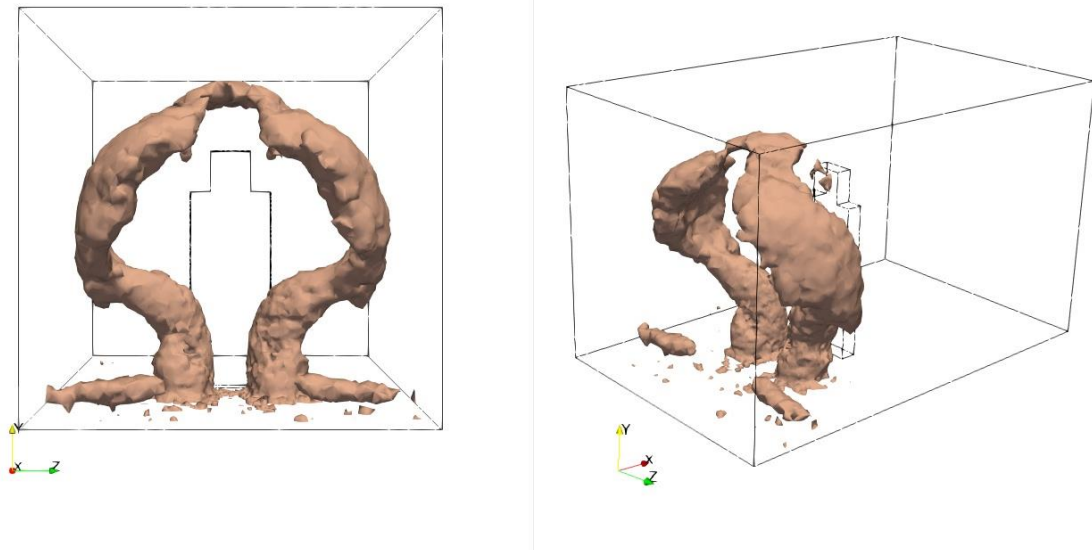


Figura 16. Representación de Lambda2 (isocontornos). Caso: WtD (T=20°C)

A continuación, se va a realizar el mismo ejercicio, pero esta vez con el flujo fijado desde la puerta hasta la ventana (DtW). Como se observan en las representaciones de los vectores de velocidad, el flujo en este caso al entrar se encuentra con la parte de atrás de la persona, igualmente la rodea y crea una recirculación posterior al obstáculo. En este caso, esta recirculación está a la altura de la boca, justo la zona de inyección de partículas, por lo que tendrá un impacto importante sobre sus trayectorias.

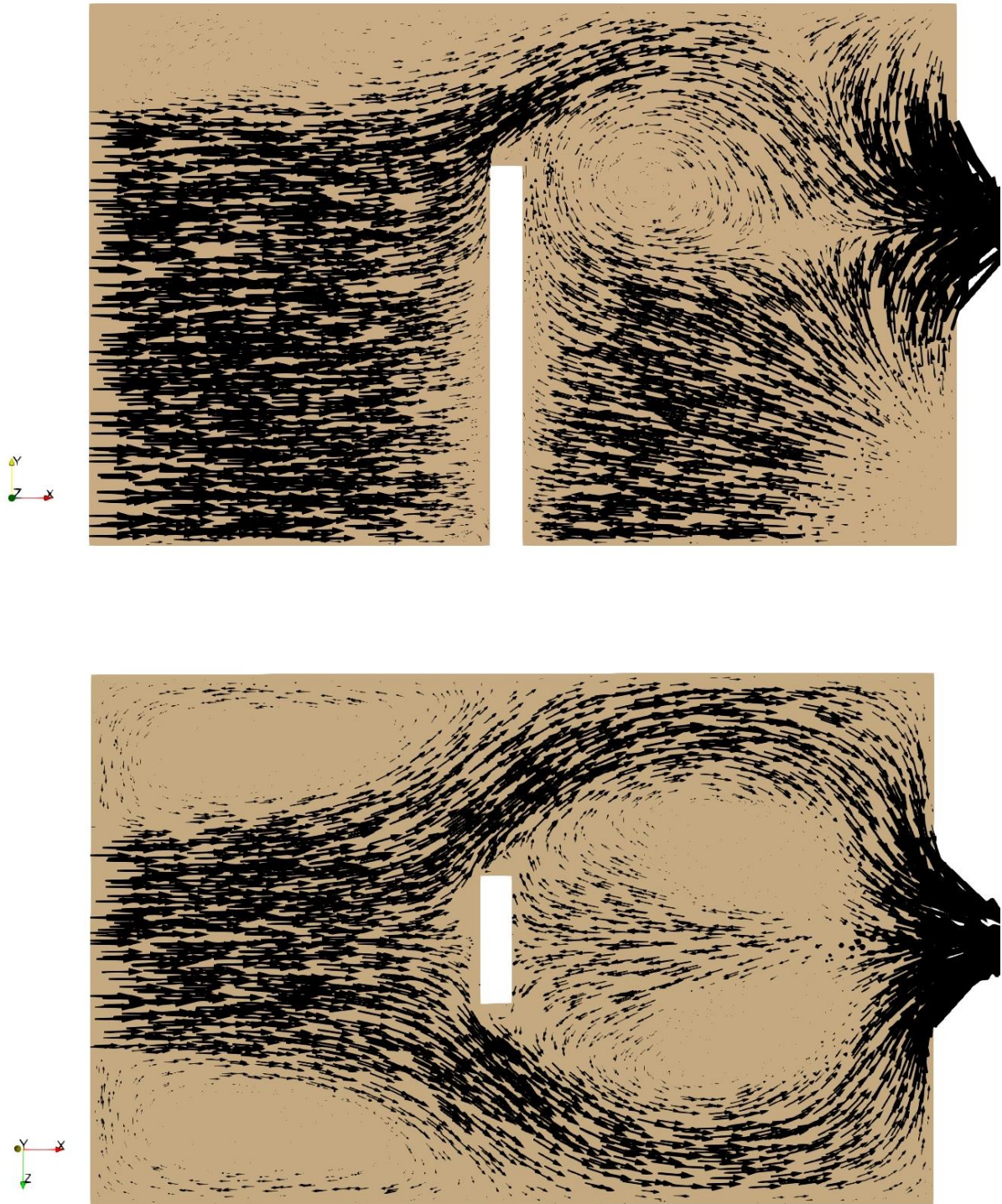


Figura 17. Campo de velocidades. Plano Z=1.25m (arriba). Plano X=1.25m (abajo). Caso: DtW (T=20°C)

Para este caso se representa igualmente los isocontornos de Λ_2 para visualizar mejor la estructura del flujo generada aguas abajo de la persona. Esta estructura va a provocar, como

se verá más adelante, la prevalencia de las gotas durante más tiempo, al estar rotando sobre esta recirculación durante el tiempo necesario hasta su evaporación.

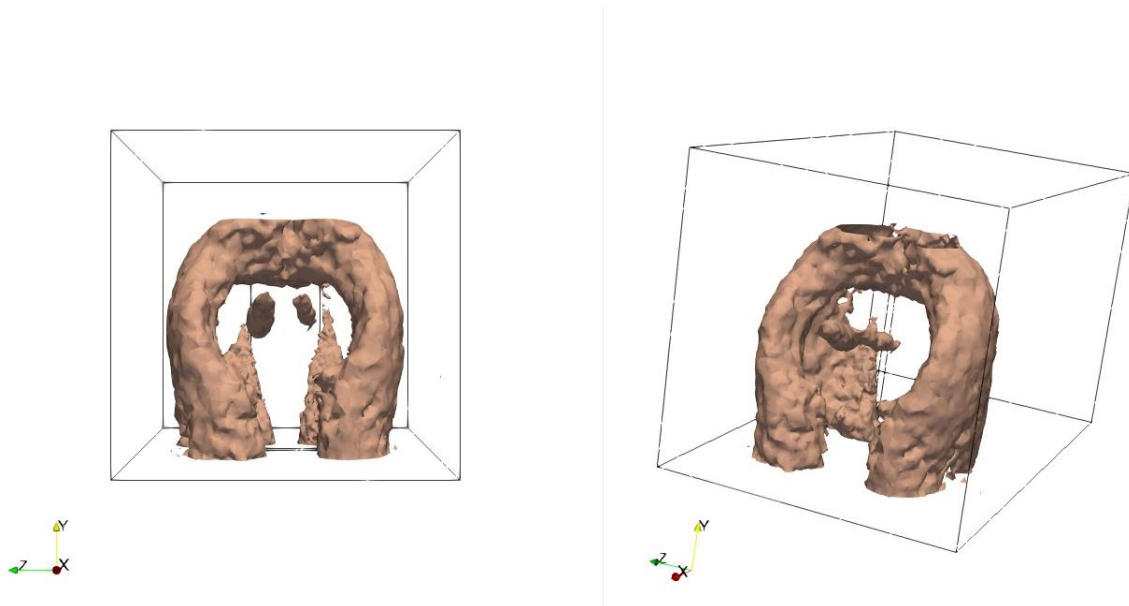


Figura 18. Representación de Lambda2 (isocontornos). Caso: DtW (T=20°C)

7.2. DISTRIBUCIÓN DE PARTÍCULAS

Para visualizar el movimiento de las partículas una vez que son expulsadas a través de la superficie que representa la boca de la persona, se ha escogido un plano central del habitáculo, en $Z=1.25$ m. Sobre el mismo se ha representado los perfiles de velocidad en el eje X, por ser la dirección principal del flujo en todos los casos simulados.

Las partículas son inyectadas en $t=0.1$ s, y se ha simulado hasta un tiempo final igual a 10 s. El total de gotas inyectadas es de 1900 (Tabla 1). Se han escogido cuatro instantes temporales para visualizar la posición que siguen las partículas una vez inyectadas. De los cuatro casos simulados se han escogido para visualización uno de cada tipo de flujo (WtD y DtW) en condiciones ambientales húmedas. Los otros dos casos, correspondientes a condiciones cálidas y secas no se muestran simplemente por no extender demasiado este epígrafe, pues las trayectorias son parecidas.

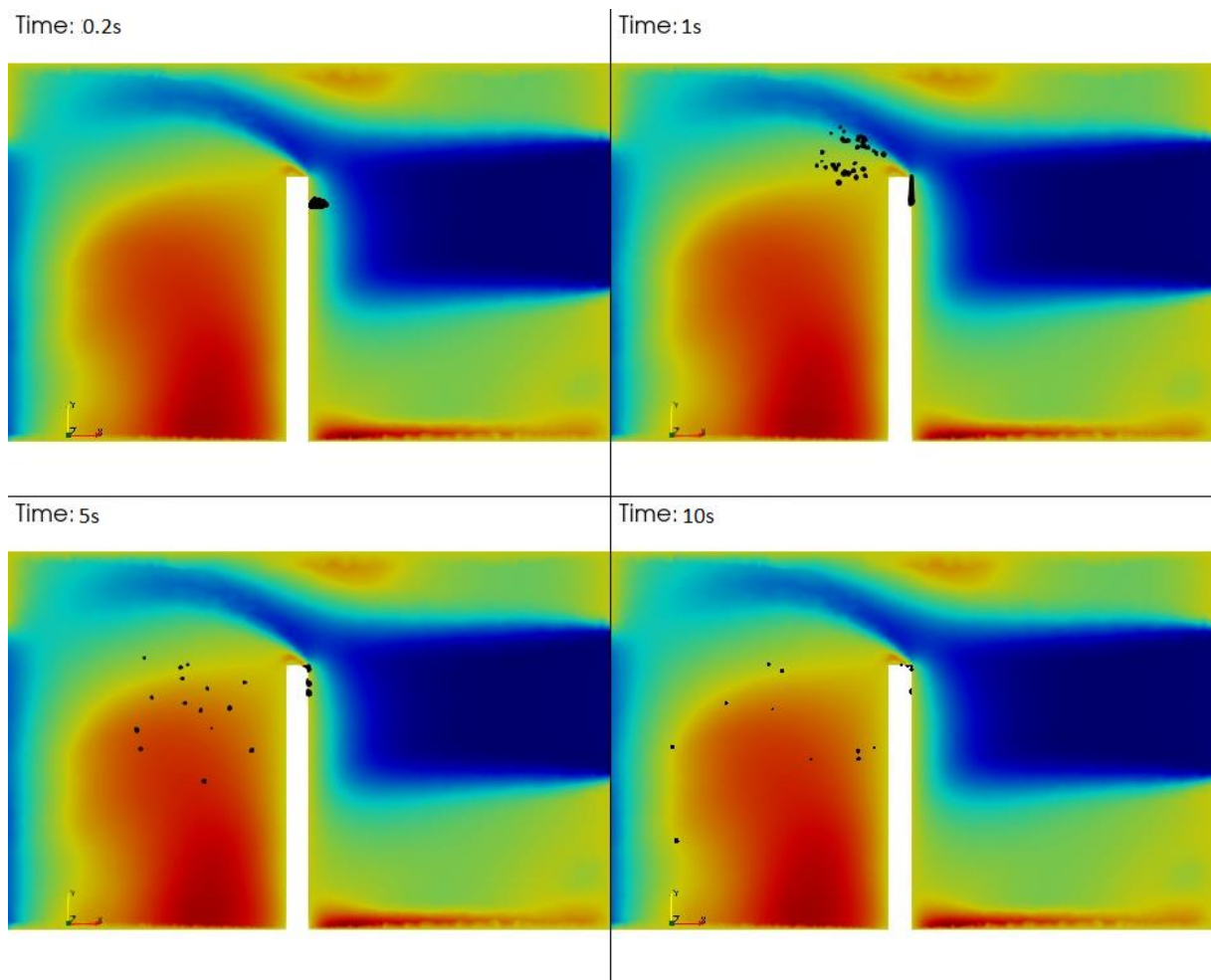


Figura 19. Posición de las gotas, vista de perfil. Campo de velocidad en X para Z=1.25 m. Caso: HR=90 %, T=10 °C, flujo de ventana a puerta.

Al comparar la Figura 19 y la Figura 20, la diferencia principal es la que se produce pocos instantes después de producirse la tos. En el caso de flujo desde la ventana, dado que va justo en sentido contrario a la salida de gotas, cambia la trayectoria inicial de las partículas que terminan impactando sobre la superficie que representa la cara de la persona, a pesar de la velocidad inicial que se les ha asignado al ser inyectadas. Para $t=1$ s, la mayor parte de las gotas inyectadas ya no están activas en la simulación, solo han sobrevivido unas pocas que pasan a la parte posterior de la persona quedando atrapadas en la zona de recirculación que veíamos al analizar el flujo de aire, mientras van perdiendo altura por acción de la gravedad.

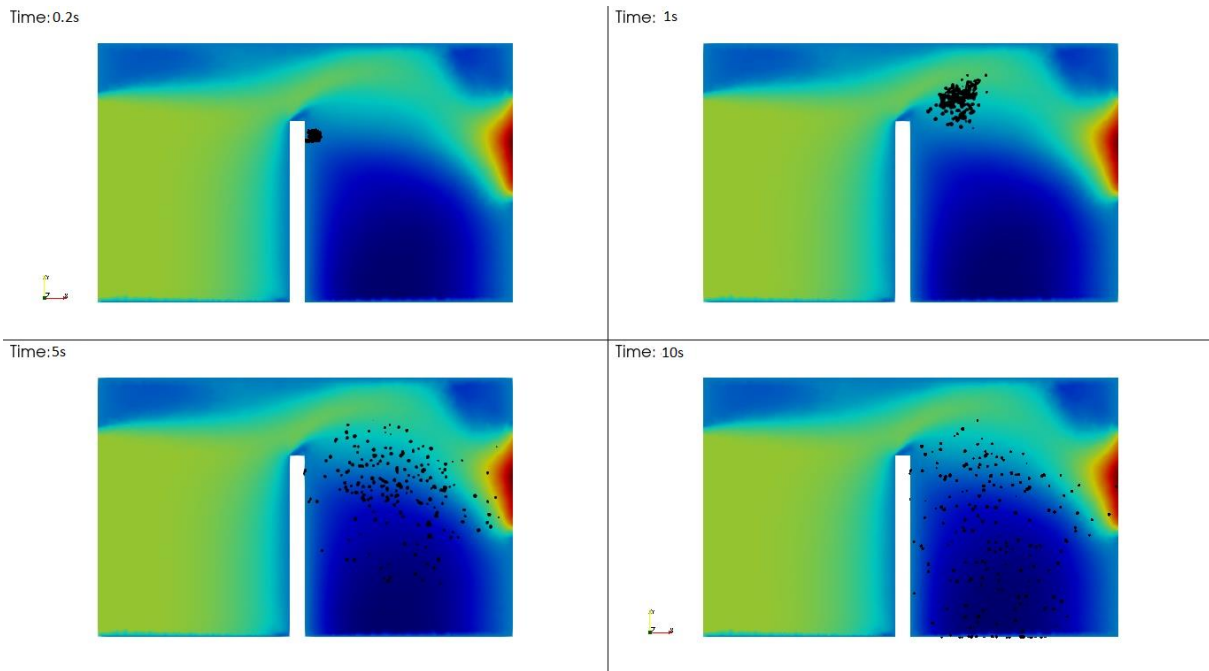


Figura 20. Posición de las gotas, vista de perfil. Campo de velocidad en X para Z=1.25m. Caso: HR=90 %, T=10 °C, flujo de puerta a ventana.

En el caso de flujo de puerta a ventana (Figura 20), en el que la brisa de aire incidiría en la espalda de la persona, las gotas van en el mismo sentido que el flujo de aire. La consecuencia es que ya no se produce el impacto de las gotas sobre la propia superficie que representa la persona, sino que al ser inyectadas van a seguir corriente de aire.

En los primeros instantes, $t=1$ s, debido a la recirculación de aire establecida justo a la altura de la boca, las gotas son arrastradas por el flujo hacia arriba para posteriormente ser impulsadas hacia abajo antes de haber escapado por la ventana. Así se ve como en los instantes $t=5$ s y $t=10$ s el número de partículas que quedan delante de la persona persiste en el tiempo, mientras que continúan su proceso de evaporación y se van depositando en el suelo.

El grado de dispersión de las gotas ha ido aumentando a medida que pasa el tiempo, si al principio todas permanecían cercanas, para el final de la simulación prácticamente ocupan todo el volumen frente a la persona.

Para mejorar la visualización se le ha asignado un factor de escala de x500 al diámetro de las gotas, aun así, es difícil determinar solo observando la gráfica cómo evoluciona el diámetro de las partículas a lo largo de la simulación. Para poder comprender como cambia el diámetro

de las partículas con el tiempo, se han graficado los histogramas de distribución de tamaño de gota para en los cuatro casos simulados para diferentes intervalos de tiempo.

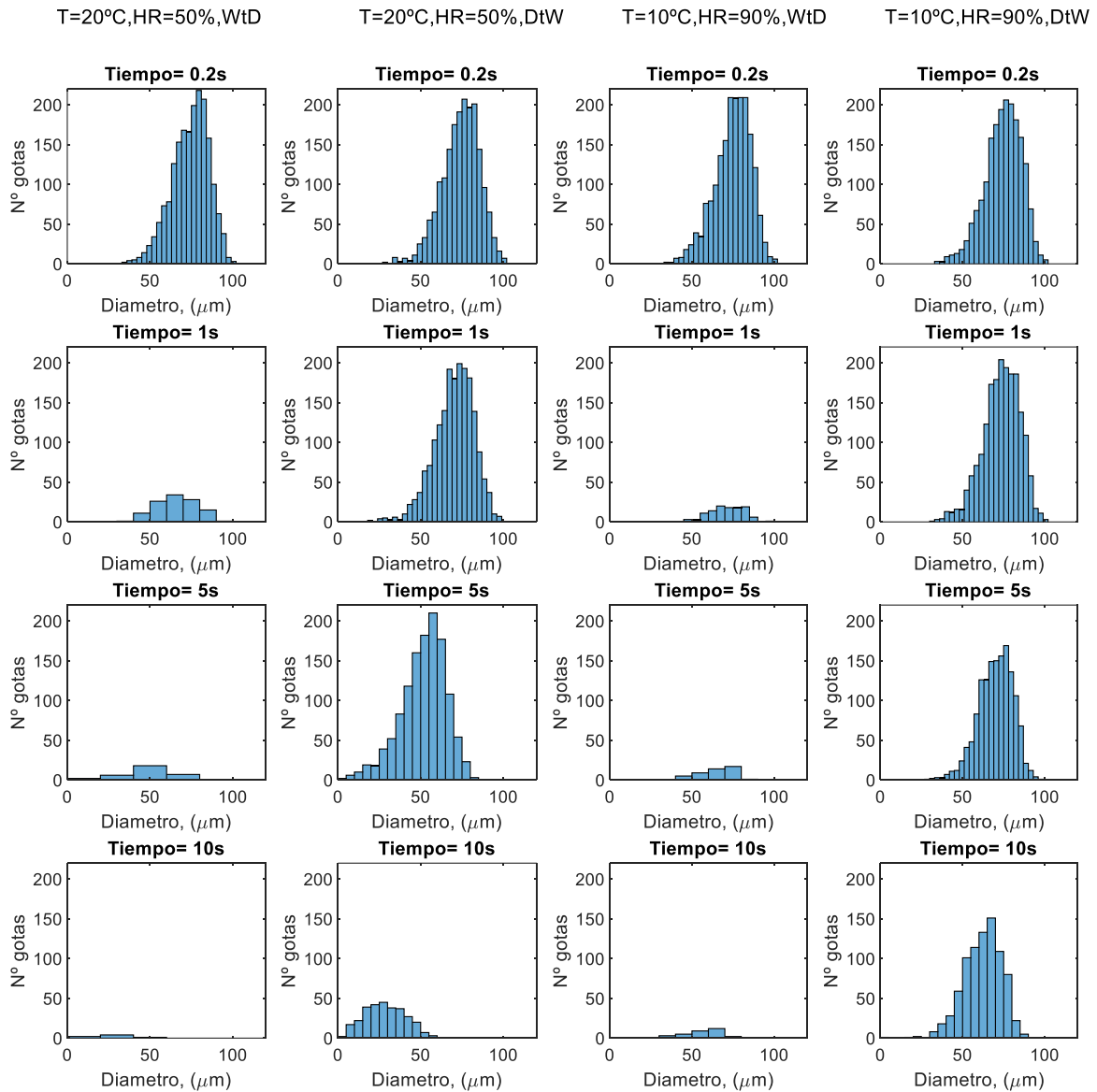


Figura 21. Histogramas de tamaño de gota en función del tiempo.

Tal y como se observaba al revisar las posiciones de las partículas, hay una clara diferencia en el número de partículas activas en la simulación dependiendo de la dirección del flujo. Además de esto, el gráfico permite visualizar de manera más clara como para el caso de condiciones de mayor humedad relativa, el tamaño medio decrece más lentamente y lo que es más interesante, el número de partículas no disminuye tan rápidamente, pues la evaporación es menor.

Para hacer un análisis desde un punto de vista más cuantitativo se han calculado el número de partículas activas en cada caso a lo largo del tiempo, Figura 22. Las partículas activas son aquellas que siguen flotando en el aire o, dicho de otra manera, aquellas que no han terminado impactando con alguna superficie o que no han sido evaporadas al completo.

Aquí se ve de manera clara que el principal efecto que determina el número de gotas activas es la dirección del flujo de aire, sobre todo en los primeros instantes tras la inyección. Como se adelantaba al observar las posiciones de las gotas en las Figuras Figura 19 y Figura 20, para el caso de flujo desde la ventana a la puerta, la mayoría de las partículas terminan impactando con la propia persona al poco de ser inyectadas pues el flujo de aire las reconduce hacia lo que representaría la cara de la persona. Esto hace que, al no modelizarse el rebote, solo sobrevivan algunas partículas que quedan atrapadas en la zona de estancamiento a la espalda de la persona.

Al comparar los resultados en función de las condiciones ambientales, vemos como la tendencia general de evolución del número de partículas activas no es función de la evaporación, pero sí que hay marcadas diferencias. Estas son más visibles en los casos del flujo de puerta hacia ventana, en esas dos simulaciones se puede apreciar cómo al reducir la evaporación (mayor humedad relativa) el número de gotas que sobreviven es mayor.

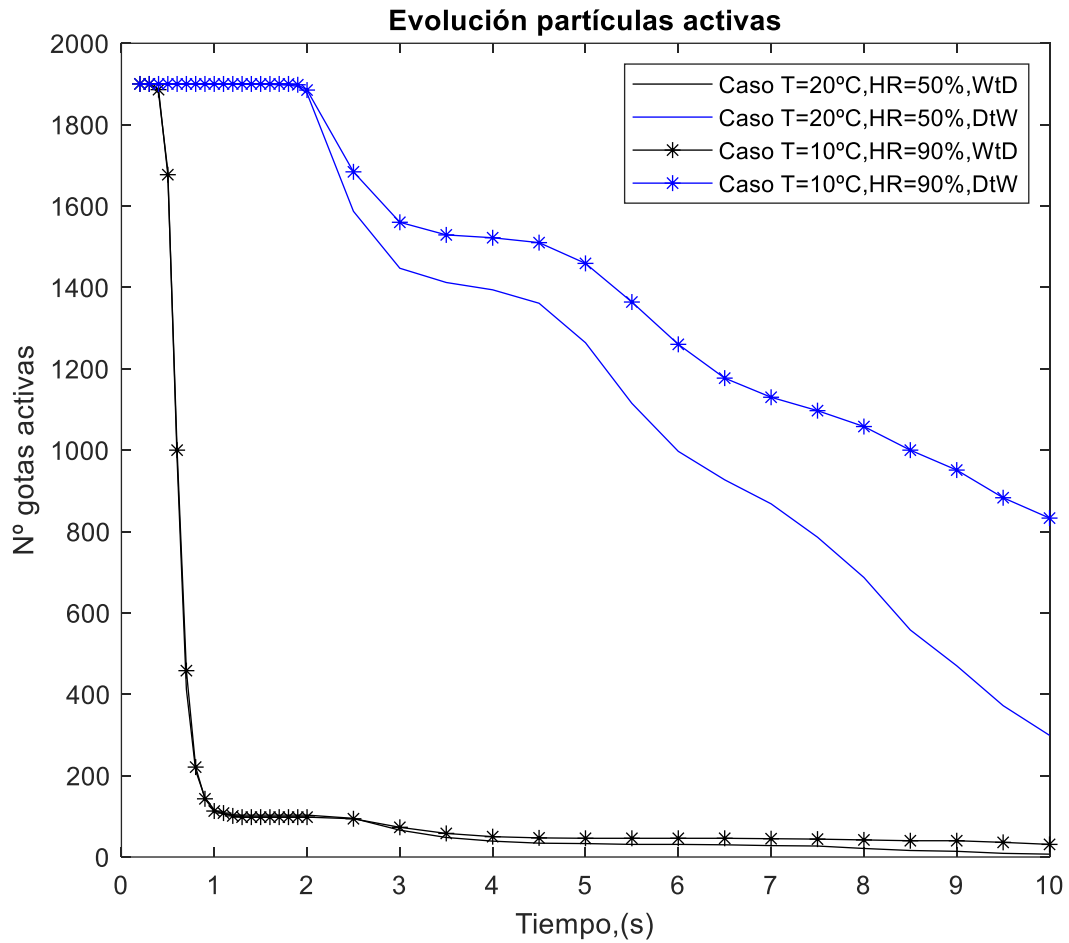


Figura 22. Evolución de partículas activas

Por tanto, si sobreviven más gotas en climas más húmedos, este mismo resultado debería de verse reflejado en el comportamiento del diámetro medio de partícula. En la Figura 23, como era esperable, lo que marca la evaporación de la gota, y por tanto su diámetro, no es el flujo sino las condiciones ambientales. Claramente los casos con una humedad relativa del 90% presentan una pendiente menos acusada que los casos con una humedad relativa del 50%, donde la tasa de evaporación es mayor.

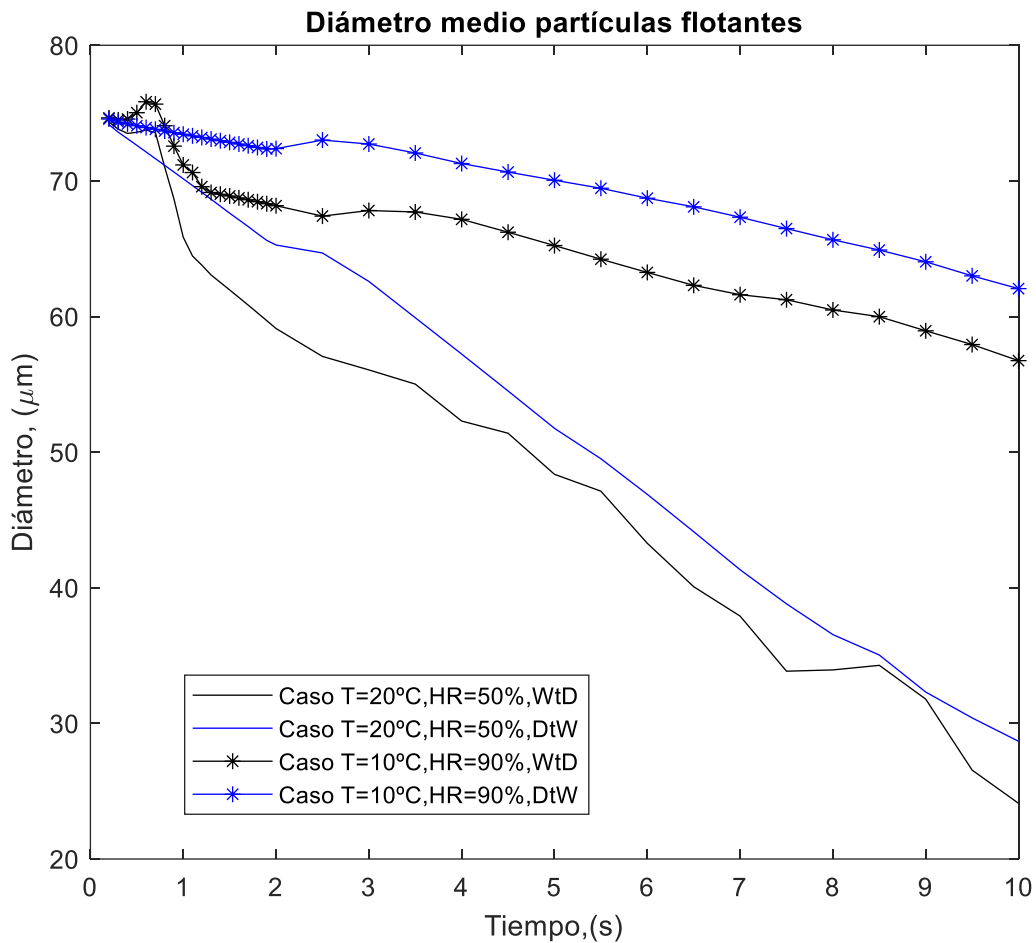


Figura 23. Evolución del diámetro medio de partículas.

Llegados a este punto sería interesante visualizar del total de gotas inyectadas, 1900, cuántas acaban sobre alguna superficie, cuántas se evaporan y finalmente cuántas quedan flotando en el aire. En los gráficos de las Figura 24 y Figura 25 se ha representado mediante un diagrama de barras cuál sería la distribución de estados de las gotas en diferentes instantes para dos de los casos. Para el caso del flujo desde puerta a ventana, al haber sobrevivido mayor número de gotas en los primeros instantes, la importancia de la evaporación a medida que pasa el tiempo es mayor, siendo la responsable de eliminar más del 80% de gotas a los 10 segundos.

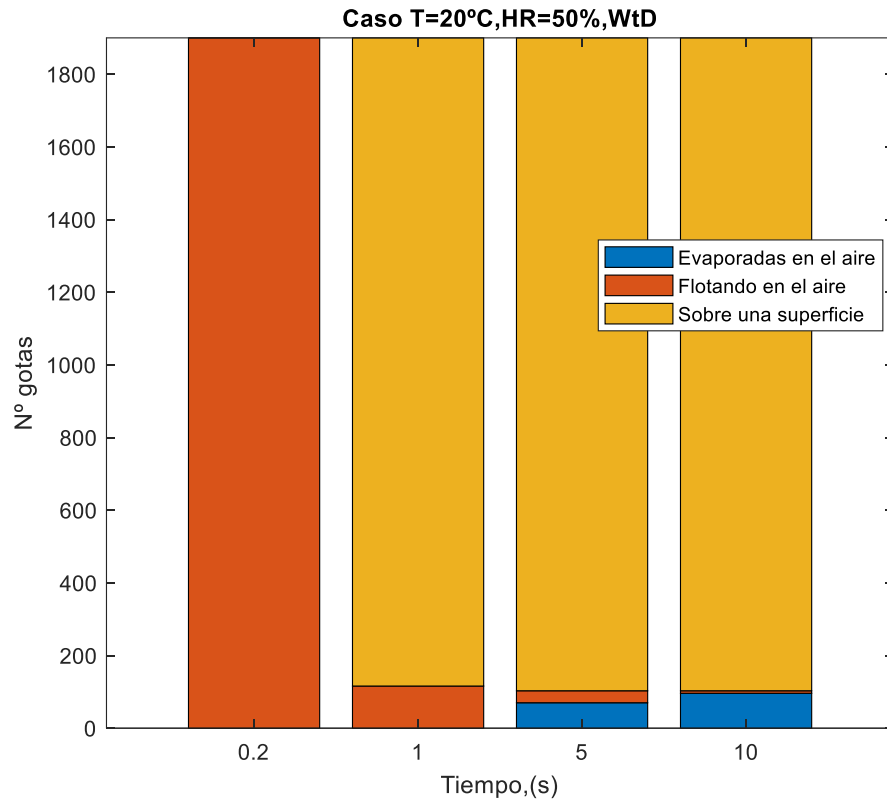


Figura 24. Estado de las gotas inyectadas. Caso T=20°C, HR=50%, WtD

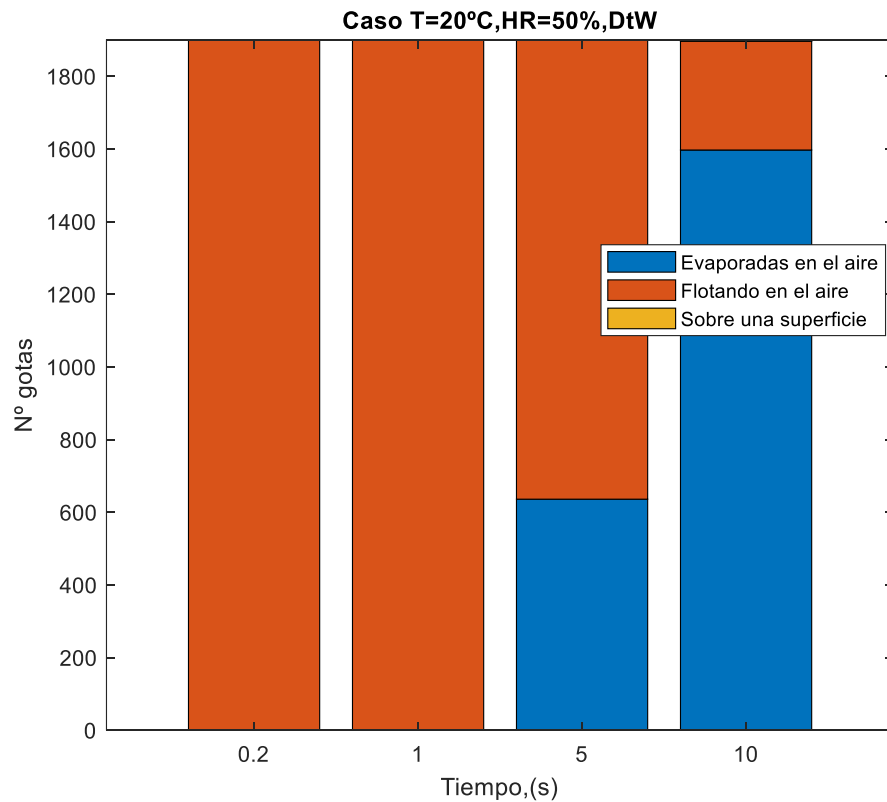


Figura 25. Estado de las gotas inyectadas. Caso T=20°C, HR=50%, DtW

7.3. EVALUACIÓN DEL RIESGO POTENCIAL DE INHALACIÓN DE GOTAS

Una de las motivaciones para realizar esta serie de simulaciones es poder conocer el nivel de riesgo al que se está expuesto una vez que gotas de saliva que pueden contener un virus son expulsadas al aire al toser o estornudar. Sabemos que, de las posibles vías de contagio, una de las más comunes (Lewis, 2021) es por inhalación de las gotas de saliva que son expulsadas por sujetos contagiados por el virus. Estas gotas que quedan suspendidas en el aire, pueden acabar en las fosas nasales o boca de algún otro individuo.

Para evaluar qué potencialidad de contagiar tendría la distribución de gotas simuladas en los casos que aquí se presentan, se ha definido una zona de riesgo. Esta zona de riesgo será aquella que pudiera estar cercana a las vías de respiratorias de una persona. Para ese análisis se ha considerado esta zona como la comprendida entre una altura de 1 m y 2 m en el eje Y.

Se ha calculado el número de partículas que en cada instante de tiempo se encuentran encerradas en este espacio y se ha obtenido su concentración por unidad de volumen. En la Figura 26 se ha representado este parámetro a lo largo del tiempo. Para el caso del flujo de ventana a puerta, debido a lo escaso del número de gotas que no quedan adheridas a la propia superficie, la concentración cae igualmente rápido.

Por el contrario, para el caso del flujo de puerta a ventana, la concentración se mantiene elevada al principio, exceptuando su descenso y ascenso abrupto entre $t=1.5$ s y 2 s. Este efecto tiene su explicación en la estructura del flujo de aire, pues como observábamos en la Figura 20, se puede ver que la circulación de aire instalada justo delante del punto de inyección impulsa a las gotas hacia arriba, para luego volverlas a llevar hacia abajo. Dejando de lado este efecto, vemos que la concentración no empieza a caer hasta más allá de $t=2.5$ s. La disminución de la concentración a partir de este punto puede ser causada por alguno de estos tres efectos: (1) que la partícula en su viaje descendente debido a la gravedad alcance una cota inferior a 1 m (nuestro límite inferior de la zona de riesgo), (2) que choque con alguna superficie lateral o (3) que se hayan evaporado.

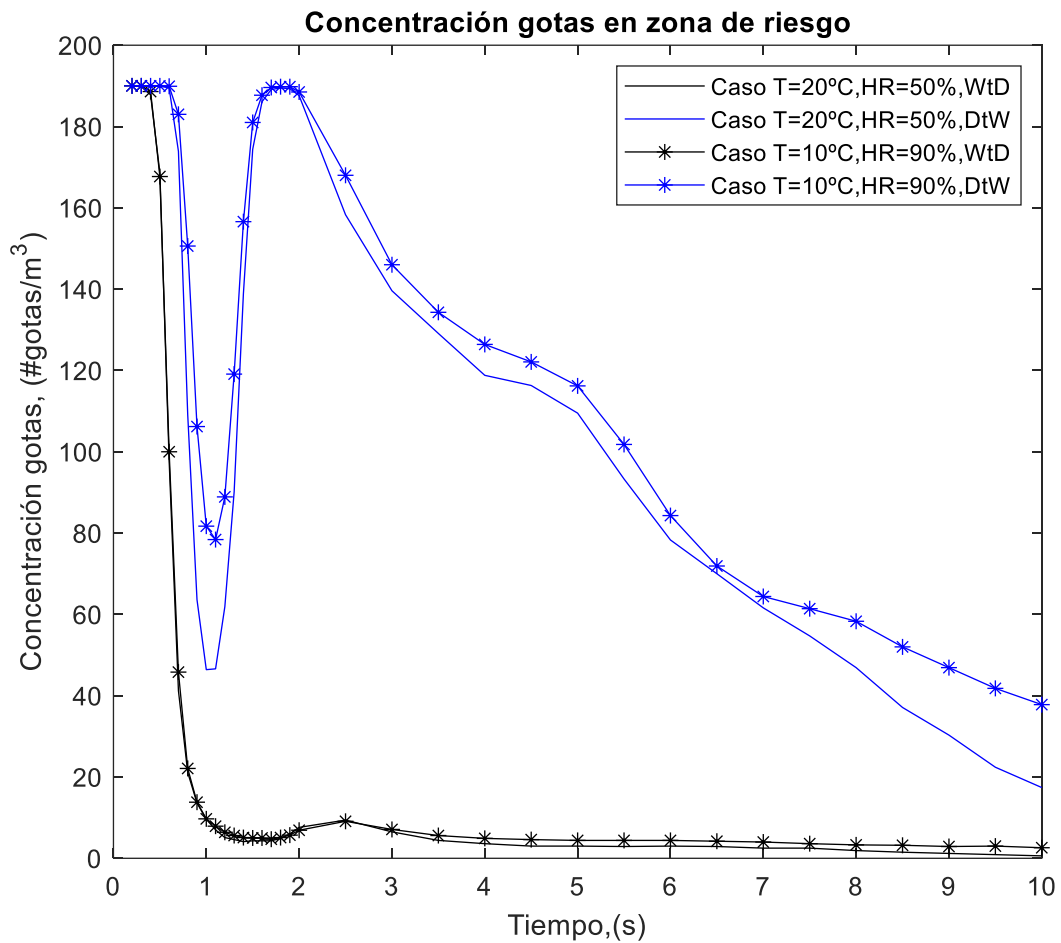


Figura 26. Concentración de gotas en zona de riesgo

Para distinguir qué efecto tiene mayor peso se ha representado (Figura 27, derecha) la evolución del número de partículas que caen a una cota inferior a 1 m (cota inferior de la zona de riesgo) y a la izquierda en la misma figura, se muestra la evolución del número de gotas que se evaporan cuando viajaban por el volumen de riesgo.

Centrándonos en los resultados del flujo de puerta a ventana, donde la mayoría de las gotas no llegan a colapsar con ninguna superficie cercana, se observan diferencias notables dependiendo de las condiciones ambientales. En el caso de la Figura 27 (derecha), se observa claramente que para el caso donde hay más humedad hay mayor número de gotas que alcanzan cotas inferiores. Esto puede explicarse porque el efecto de la evaporación es menor y de ahí que el diámetro de las gotas no se reduzca tanto con el tiempo. Como consecuencia

los efectos de flotación son mayores (ecuación 4.10), maximizando la velocidad en sentido descendente.

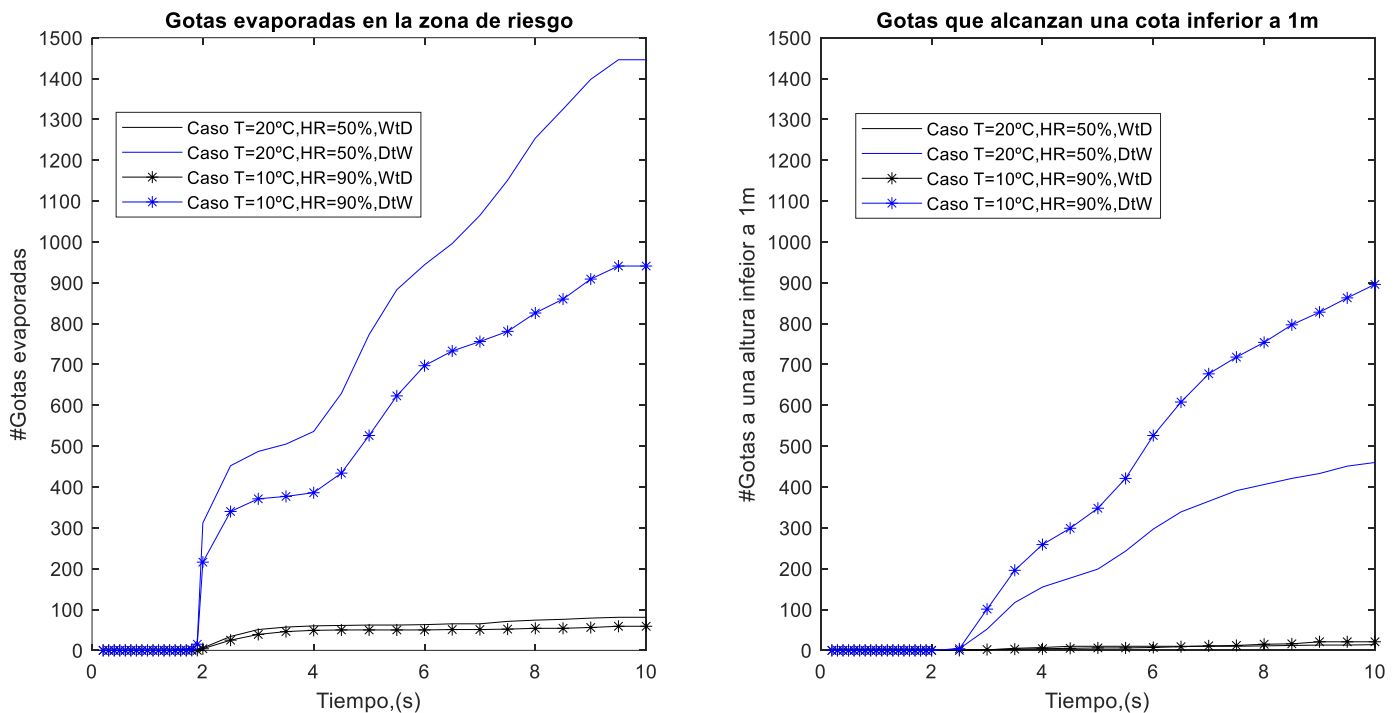


Figura 27. Gotas evaporadas en la zona riesgo (izquierda). Gotas que llegan a alcanzar una cota inferior a 1 m. (derecha)

Por el contrario, para el caso donde la humedad relativa es menor, hay mayor evaporación y el diámetro medio de la gota va disminuyendo con mayor rapidez. Esto hace que los efectos de flotación tengan menos importancia, las gotas caen más lentamente, al tiempo que van evaporándose. De esta manera, para el caso de clima seco, la evaporación es el actor principal en el proceso de reducción de número de partículas en la zona de riesgo, mientras que en clima húmedo prácticamente se reparten este efecto al 50% entre la propia deposición de partículas por acción de la gravedad y la evaporación.

Globalmente, para el escenario de flujo de puerta a ventana, se podría decir que el caso de clima seco sería el más seguro, pues para el tiempo final simulado se ha reducido el riesgo en más de un 90%, algo mayor comparado con el clima húmedo. Sin embargo, como ya se ha adelantado, en este modelo se ha asumido que la gota está formada al 100% por agua, esto supone la evaporación total de la misma. Los resultados experimentales muestran que esto no es del todo cierto, y siempre queda un cierto residuo sólido ('droplet nuclei'), que al tener

un diámetro muy reducido puede quedar suspendido el aire mucho tiempo, luego en el presente estudio se estaría subestimando este efecto, y por tanto el riesgo de contagio.

Por último, uno de los objetivos marcados al inicio de este trabajo fue establecer un radio o distancia segura a partir de la cual la probabilidad de contagio se redujera. Para intentar responder a esta pregunta se ha computado en cada instante y para cada partícula la proyección sobre el plano horizontal de la recta que une cada partícula con el punto de inyección.

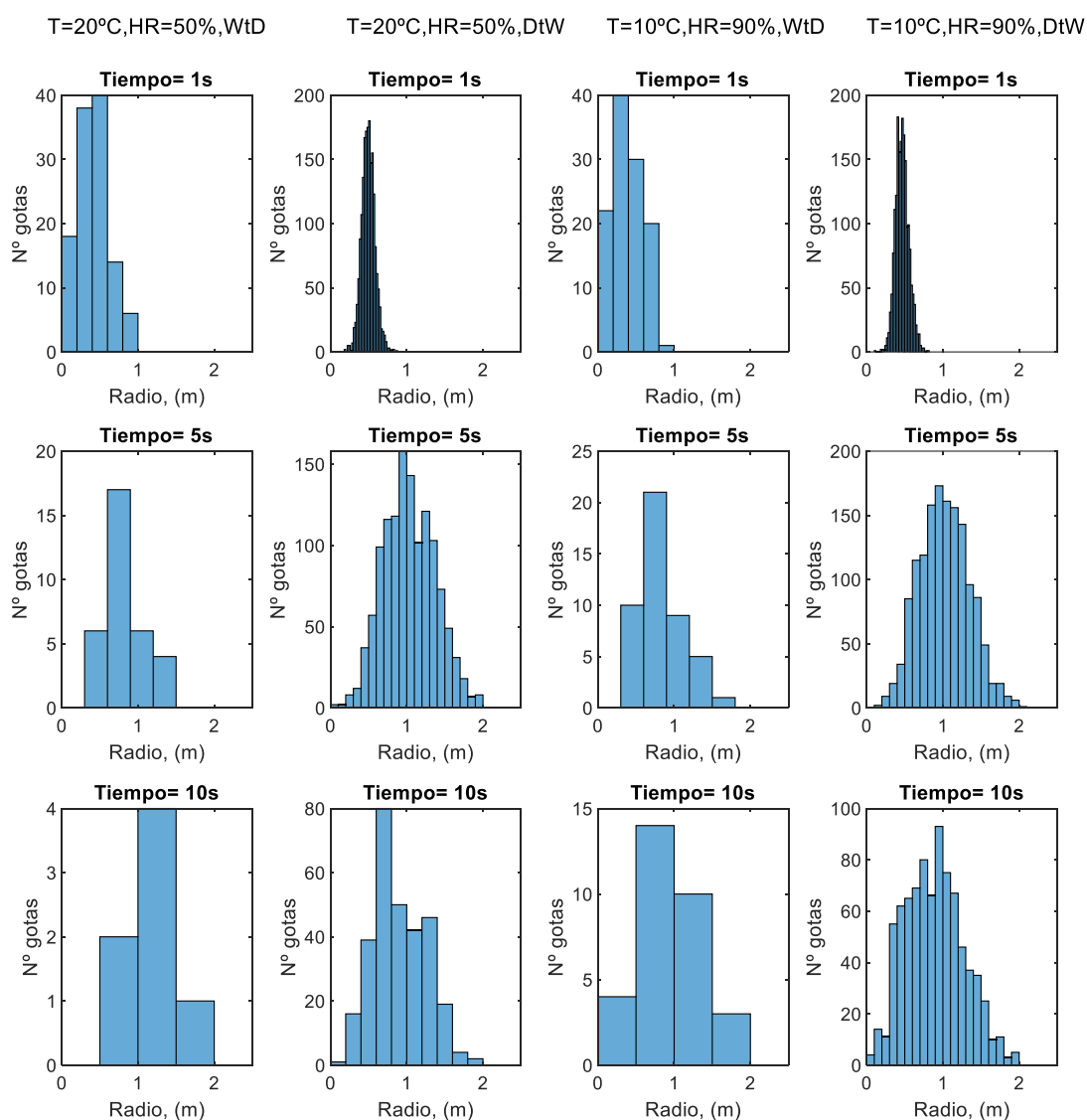


Figura 28. Distancia al punto inyección en el plano horizontal.

En la Figura 28 se muestran para los cuatro escenarios simulados la distancia al punto de inyección de cada partícula para varios instantes en forma de histograma. Si comparamos las

gráficas para $t=5$ s y $t=10$ s, vemos que la forma de los histogramas para el caso de flujo de ventana a puerta (donde más partículas hay) apenas cambia, es decir, el grueso de las gotas sigue estando prácticamente al mismo radio, por tanto, podemos decir que la mayor dispersión se produce al poco tiempo de la inyección, pero que posteriormente se mantiene. Esto es importante de cara a determinar un radio seguro. Para el caso de flujo de ventana a puerta, es más complicado por el menor número de gotas activas. En cualquier caso, parece que son muy pocas gotas las que llegan al final del dominio computacional.

En cuanto a determinar un radio seguro, hay que tener en cuenta que nuestro dominio tiene un radio de 2m, esto quiere decir que las gotas han ocupado prácticamente toda la región de estudio. Sin embargo, observando la distribución, podemos decir que seguir las recomendaciones de distancia de 1.5m, disminuye notablemente el riesgo de inhalar gotas.

8. Conclusiones.

- Se ha generado un dominio computacional cuya geometría representa una habitación de tamaño estándar, con aberturas en sus paredes que simulan una ventana y una puerta. En el centro del dominio computacional se ha incluido un obstáculo cuya forma es una representación simplificada de una persona.
- Se ha definido un modelo Euleriano-Lagrangiano para resolver el flujo alrededor de la persona (parte Euleriana) y resolver las trayectorias de las gotas que son inyectadas al toser (parte Lagrangiana). Se ha establecido un procedimiento simplificado de simulación, donde primero se resuelve el campo estacionario de velocidades, presiones y temperaturas establecido alrededor de la persona. Hecho esto, se resuelven desde un punto de vista Lagrangiano las ecuaciones de cantidad de movimiento, balance energético y balance másico de cada una de las partículas inyectadas en el modelo. Esto proporciona como resultado su posición, temperatura y diámetro sobre cada paso de tiempo discretizado.
- Se ha llevado a cabo un análisis de sensibilidad de malla. Finalmente se ha elegido una malla con suficiente refinamiento sobre todo en la zona de interés del problema, es decir, en la zona cercana a la inyección. Se ha priorizado esto sobre la precisión del resultado en las paredes de la habitación.
- Se ha validado el modelo de evaporación utilizado al comparar el proceso de evaporación de una gota en una atmósfera estática, sin flujo de aire a su alrededor, con un trabajo experimental que reproduce estas mismas condiciones.
- El modelo numérico desarrollado se ha simulado para cuatro escenarios distintos. Dos condiciones de flujo, uno desde la ventana hacia la puerta, y otro en sentido contrario; y dos condiciones ambientales, un ambiente seco ($T=20\text{ }^{\circ}\text{C}$, $\text{HR}=50\%$) y otro húmedo y frío ($T=10\text{ }^{\circ}\text{C}$, $\text{HR}=90\%$). En todos los casos se ha simulado un proceso de tos con las mismas condiciones de inyección, que tiene lugar en $t=0.1\text{ s}$ y dura 0.1 s . Se ha simulado hasta $t=10\text{ s}$.
- Los principales resultados obtenidos muestran que:
 - La dirección del flujo y su interacción con el obstáculo (en este caso la propia persona) puede tener un efecto muy importante. Cuando se ha impuesto la condición de flujo de ventana a puerta, al estar la persona en la dirección del flujo, las partículas acaban depositándose a los pocos instantes sobre la misma. Como consecuencia, el número de gotas que permanecen flotando en el modelo en estos casos es muy pequeña.
 - Para el caso de flujo de puerta a ventana, las partículas no se encuentran con ningún obstáculo en su camino. Prácticamente en el tiempo de simulación no se depositan en ninguna pared. Además, por la estructura de flujo delante del punto

de inyección, se favorece la dispersión y se extiende el tiempo de residencia. Al contrario de lo que se podría pensar, las gotas no alcanzan la ventana en una trayectoria recta, sino que se ven inmersas en la recirculación impuesta aguas abajo del obstáculo (persona).

- Para el caso del flujo de puerta a ventana, los efectos que reducen el número de partículas en la zona de riesgo son fundamentalmente dos: la evaporación y su deposición en el suelo. En función de las condiciones ambientales, se potencia más uno u otro. Para el caso del clima húmedo, el diámetro medio de gota decrece en menor medida que para el clima seco. Esto es lógico, pues hay menos evaporación. Consecuentemente, al tener gotas más grandes, mayores son los efectos de flotación, y menos tiempo se tarda en que la gota se deposite en el suelo. Al contrario ocurre con el clima seco, aquí la evaporación es la principal culpable de la reducción del riesgo, disminuyendo mucho más la concentración de gotas en la zona de riesgo que el propio descenso de las partículas por acción de la gravedad.
- En resumen.
 - El caso de flujo de ventana a puerta, dado que tiene sentido contrario a la expulsión de las gotas de saliva, no aporta mucho para el análisis de trayectorias pues la práctica totalidad de las gotas quedan adheridas a la propia cara de la persona. Esto, por otro lado, pone de manifiesto la influencia de los obstáculos sobre todo cuando están próximos al punto de inyección y todavía no hay mucha dispersión.
 - Para el caso de flujo de puerta a ventana, se observa como una leve brisa no es suficiente para eliminar el riesgo de manera inmediata, y se ve como incluso a los 10 s de simulación siguen existiendo gotas en el modelo. En este caso la estela que deja el flujo tras impactar con la persona es la principal culpable de la dispersión y el aumento del tiempo de residencia de las gotas.
 - La evaporación y la sedimentación juegan a nuestro favor como efectos de reductores del riesgo. En este caso concreto la evaporación parece la mejor aliada, pues para el caso del clima seco, al final de la simulación ($t=10s$) la concentración de gotas en la zona de riesgo es menor.
 - Seguir las recomendaciones de dejar una distancia de 1.5m desde el foco emisor reduce la probabilidad de encontrarse con gotas exhaladas por un sujeto infectado.

9. Trabajo futuro

A continuación, se presentan algunas líneas de trabajo que se considera interesante seguir explorando y que pueden completar en gran medida el trabajo presentado:

1. Tal y como se ha explicado, se ha conseguido reducir de una manera importante los recursos computacionales al utilizar el procedimiento simplificado de simulación resumido en el flujograma de la Figura 5. Seguir utilizado este procedimiento de cálculo depende de cuánto error se está cometiendo al obviar el chorro de aire que acompaña al fenómeno de tos o estornudo. Por este motivo, se cree importante hacer una comparativa entre un procedimiento y otro, y ver si el error cometido es lo suficientemente menor como para poder utilizar de manera segura y robusta este esquema de resolución.
2. Incluir una composición más real de la gota, incluyendo ese 1% de NaCl que otros autores han tenido en cuenta. Esto tiene un peso importante a la hora de determinar los factores de riesgo, pues cuando ahora concluimos que un clima seco puede ser más seguro debido a la evaporación, se puede terminar convirtiendo en lo contrario si los residuos cristalizados de las gotas quedan flotando más tiempo, en comparación con un clima húmedo, donde las gotas no se evaporan, pero salen de la zona de riesgo por efectos gravitacionales.
3. Incluir el efecto de alguna extracción forzada en el modelo u otros sistemas de ventilación y analizar su impacto.

10. REFERENCIAS

- Asadi, S., Wexler, A., Cappa, C., Barreda, S., Bouvier, N., & Ristenpart, W. (2019). Aerosol emission and superemission during human speech increase with voice loudness. *Scientific Reports*, 2348.
- Barua, D. (2005). *Encyclopedia of Coastal Science. Encyclopedia of Earth Science Series*. Dordrecht: Springer.
- Basu, S., Kabi, P., & Chaudhuri, S. (2020). Insights on drying and precipitation dynamics of respiratory droplets from the perspective of COVID-19. *Physics of Fluids*, 32, 123317.
- Biswas, R., Pal, A., Pal, R., Sarkar, S., & Mukhopadhyay, A. (2022). Risk assessment of COVID infection by respiratory droplets from cough for various ventilation scenarios inside an elevator: An OpenFOAM-based computational fluid dynamics analysis. *Physics of Fluids*, 34, 013318.
- Chao, C., Wan, M., Morawska, L., Johnson, G., Ristovski, Z., Hargreaves, M., . . . Katoshevski, D. (2009). Characterization of expiration air jets and droplet size distributions immediately at the mouth opening. *Aerosol Science*, 122-133.
- Chillón, S., Ugarte-Anero, A., Aramendia, I., Fernández-Gamiz, U., & Zulueta, E. (2021). Numerical modeling of the spread of cough saliva droplets in a calm confined space. *Mathematics*, 9, 574.
- Duguid, J. (1946). The size and the duration of air-carriage of respiratory droplets and droplet-nuclei. *Journal of Hygiene*(44), 471-479.
- Feng, Y., Merchal, T., Sperry, T., & Yi, H. (2020). Influence of wind and relative humidity on the social distancing effectiveness to prevent COVID-19 airborne transmission: A numerical study. *Journal of Aerosol Science*, 147, 105585.
- Jeong, J., & Hussain, F. (1995). On the identification of a Vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 69-80.
- Lewis, D. (2021). COVID-19 rarely spreads through surfaces. So why are we still deep cleaning? *NATURE*, 590, 26-28.

- Lindsley, W., Pearce, T., Hudnall, J., Davis, K., Davis, S., Fisher, M., . . . Palmer, J. (2012). Quantity and Size Distribution of Cough-Generated Aerosol Particles Produced by Influenza Patients During and After Illness. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 9(7), 443-449.
- Merkel, A. (2019). *Modeling a Xenon Tank, its Heat Convection and In-Orbit Behavior with 2D CFD Method*. Aachen: Master Thesis. Institut für Strahlantriebe und Turbomaschinen.
- Morawska, L. J. (2008). Droplets expelled during human expiratory activities and their origin. Copenhagen, Denmark.: Proceedings of the 11th international conference on indoor air quality and climate. Indoor air 2008.
- Stiti, M., Castanet, G., Corber, A., Alden, M., & Berrocal, E. (2021). Transition from saliva droplets to solid aerosols in the context of COVID-19 spreading. *Environmental Research*(204), 112072.
- van Doremalen, N., Bushmaker, T., Morris, D., Holbrook, M., Gamble, A., Williamson, B., . . . Munster, V. (2020). Aerosol and surface stability of SARS-CoV-2 as compared with SARS-CoV-1. *New England Journal of Medecine*, 382(16), 1564-1567.
- Visione, M., Lanzetta, M., & Lappa, M. (2021). Three-dimensional simulation of clouds of multi-disperse evaporating saliva droplets in a train cabin. *Physics of Fluids*, 33, 083318.
- Vuorinen, V., Aarnio, M., Alava, M., Alopaeus, V., & Atanasova, N. (2020). Modelling aerosol transport and virus exposure with numerical simulations in relation to SARS-CoV-2 transmission by inhalation indoors. *Safety Science*, 130, 104866.
- World Health Organization. (2022, March 13). *WHO Coronavirus (COVID-19) Dashboard*. <https://covid19.who.int/>
- Xie, X., Li, Y., Sun, H., & Liu, L. (2009). Exhaled droplets due to talking and coughing. *Journal of the Royal Society Interface*, 6, 703-714.
- Zhang, R., Li, Y., Zhang, A. L., Wang, Y., & Molina, M. J. (2020, June 30). Identifying airborne transmission as the dominant route for the spread of COVID-19. *PNAS*, 117(26), 14857-14863.

- Zhang, Z., & Chen, Q. (2006). Experimental measurements and numerical simulations of particle transport and distribution in ventilated rooms. *Atmospheric Environment*, *40*, 3396-3408.
- Zhu, S., Kato, S., & Yang, J.-H. (2005). Study on transport characteristics of saliva droplets produced by coughing in a calm indoor environment. *Building and Environment*(41), 1691-1702.

Anexo 1. Vistas de planta de dispersión de gotas

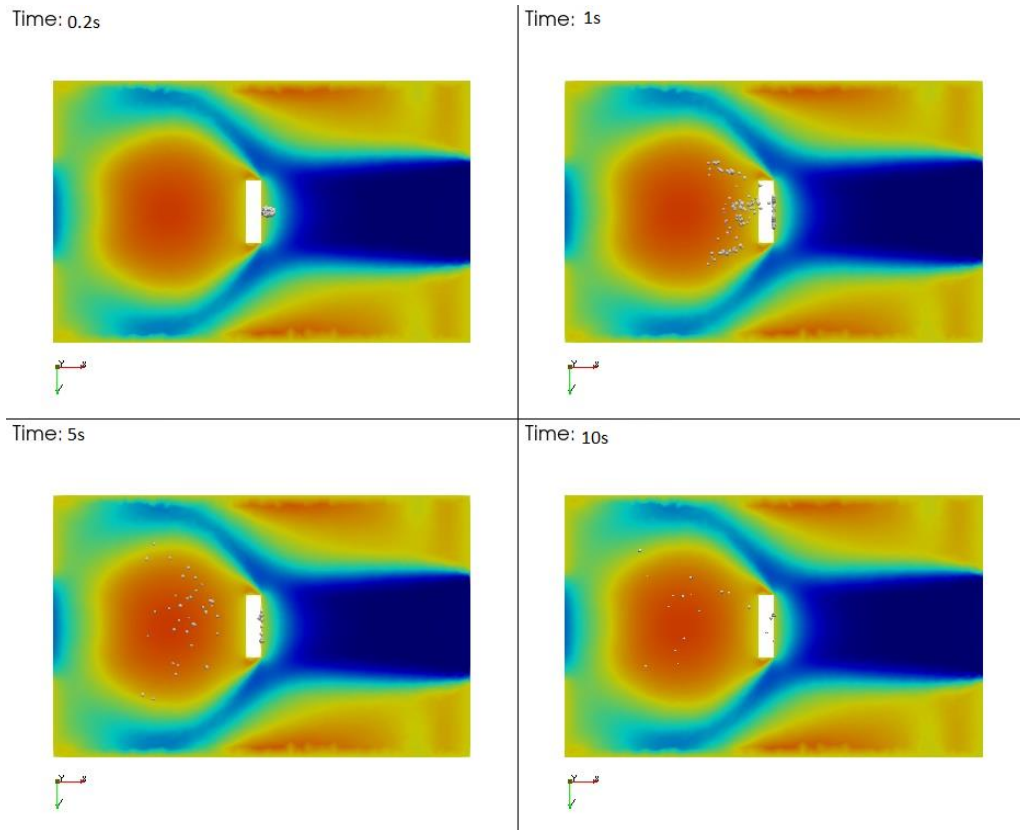


Figura 29. Distribución gotas plano $Y=1.25$. Caso flujo WtD. Contornos de velocidad en dirección X.

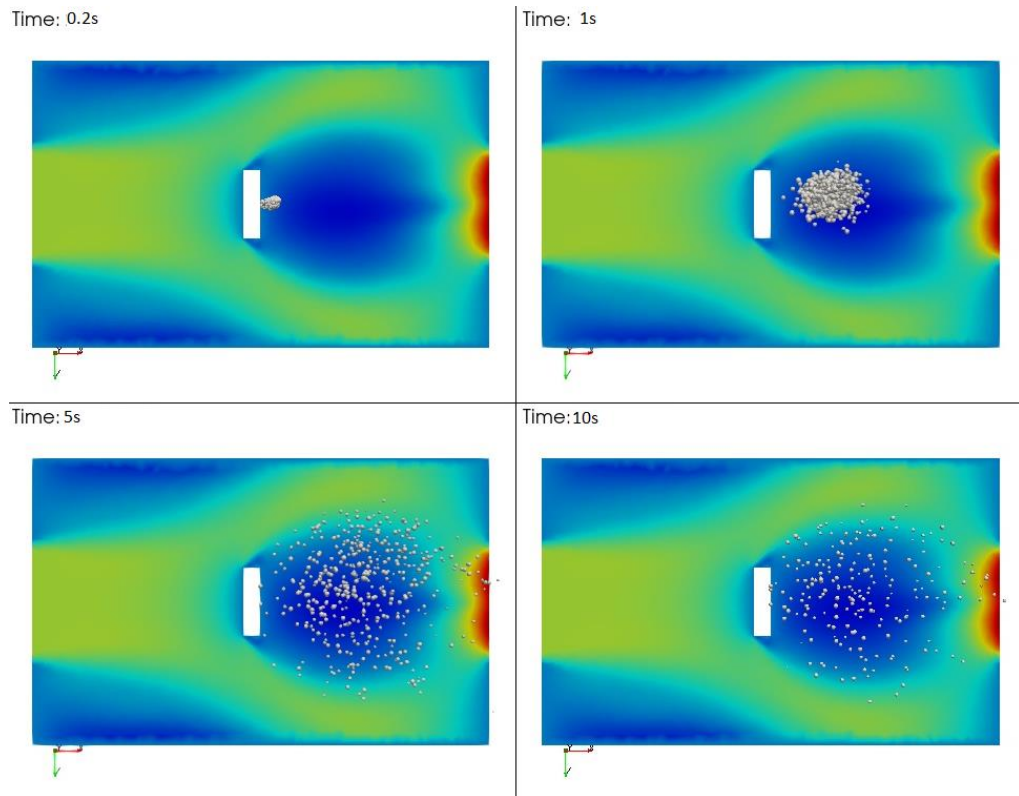


Figura 30. Distribución gotas plano $Y=1.25$. Caso flujo DtW. Contornos de velocidad en dirección X.