

TESIS CARRERA DE DOCTORADO EN CIENCIAS DE
LA INGENIERÍA

SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL FENÓMENO DE
EBULLICIÓN EMPLEANDO EL MÉTODO DE LATTICE
BOLTZMANN

Ezequiel O. Fogliatto

Doctorando

Dr. Federico E. Teruel

Director

Dr. Alejandro Clausse

Co-director

Miembros del Jurado

Dr. J. J. Jurado (Instituto Balseiro)

Dr. Segundo Jurado (Universidad Nacional de Cuyo)

Dr. J. Otro Jurado (Univ. Nac. de LaCalle)

Dr. J. López Jurado (Univ. Nac. de Mar del Plata)

Dr. U. Amigo (Instituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche)

23 de Octubre de 2020

Departamento de Mecánica Computacional – Centro Atómico
Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A mi familia

Índice de símbolos

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xi
1. Simulación de ebullición en FC-72	1
1.1. Descripción del experimento	2
1.2. Modelo numérico	4
1.2.1. Selección de los parámetros de simulación	4
Bibliografía	11

Índice de figuras

1.1.	Secuencia de fabricación del chip de ebullición, que contiene las micro-cavidades, los sensores de temperatura integrados (amarillo), y la resistencia calefactora integrada (azul). Reimpreso de [1].	3
1.2.	Izquierda: imagen SEM de una sección a través de una cavidad elongada. Derecha: imagen de la apertura de la cavidad.	4
1.3.	Imágenes de alta velocidad de la secuencia de crecimiento de una burbuja en una cavidad aislada.	4
1.4.	Ecuaciones de estado y densidades de coexistencia para FC72.	7
1.5.	Perfil de densidad a través de la interfase de una burbuja estacionaria, calculada para $T_r = 0,73438$ usando la ecuación de Peng-Robinson con $a = 1/50$, $b = 2/21$ y $\omega = 0,5$	8
1.6.	Problema de Laplace	9

Índice de tablas

1.1. Propiedades principales de FC-72 a $p = 1$ atm y $T = 329,75$ K.	6
1.2. Números adimensionales del experimento de ebullición de Hutter.	7

Capítulo 1

Simulación de ebullición en FC-72

En los primeros capítulos de esta tesis se introdujo, analizó y validó un modelo que permite reproducir adecuadamente una ecuación de energía para flujo multifásico, tomando como base una nueva ELB con operador de colisión MRT que debe ser resuelta en forma simultánea con otra ELB hidrodinámica de la familia pseudopotential. El desarrollo de este nuevo modelo no quedó restringido únicamente a la nueva ecuación y su justificación formal, sino que forma parte de una metodología de análisis destinada a realizar simulaciones consistentes de transferencia de calor en flujo multifásico.

El nuevo modelo, en sus versiones D2Q9 y D3Q15, fue validado mediante la resolución de problemas en los que es posible obtener una solución analítica. En estos **problemas**, en su mayoría unidimensionales, fue posible discriminar diferentes aspectos de las ecuaciones macroscópicas recuperadas, permitiendo desarrollar un análisis de las ELB desde un punto de vista global, que abarca aspectos fundamentales de las técnicas numéricas clásicas como precisión y consistencia.

Esta metodología de verificación consiste en un primer paso obligatorio en el proceso de validación de cualquier técnica numérica o modelo novedoso. Sin embargo, siempre que sea posible, este proceso debe completarse con la evaluación de situaciones más complejas y que involucren una fenomenología similar a la que se pretende resolver con la nueva técnica, tomando mediciones o resultados de simulaciones que puedan usarse para construir una base de comparación sólida.

En este aspecto, la representación de experimentos o simulaciones de ebullición como parte de la validación resulta una tarea sumamente compleja. El modelo de lattice Boltzmann propuesto constituye un mecanismo alternativo para obtener la solución de ecuaciones diferenciales de conservación de masa, impulso y energía en flujo multifásico, y no involucra el modelado de características microscópicas del fenómeno de ebullición que surgen de aquellos enfoques basados en las mayores escalas espaciales. Como destaca en la extensa revisión de Liang y Mudawar [2], la dinámica de estos procesos no depende simplemente de las propiedades del fluido, sino que se encuentra fuertemente

influenciada por las características microscópicas de la superficie calefactora. De esta manera, los aspectos macroscópicos más representativos, como temperatura o flujo de calor en la superficie, o tamaño de las burbujas, presentan una fuerte dependencia con la cantidad y forma de los sitios de nucleación, porosidad y permeabilidad de la superficie, tensión superficial y ángulo de contacto. Por lo tanto, esta fuerte dependencia dificulta la selección de experimentos que puedan ser usados como casos de validación, ya que en muchas ocasiones no es posible determinar a priori estas propiedades que deben ser reproducidas numéricamente.

A pesar de estas restricciones inherentes al fenómeno, en los últimos años se produjo un avance significativo en el desarrollo de microdispositivos para llevar a cabo experimentos de ebullición, permitiendo un notable control sobre los sitios de nucleación [3, 4]. De esta manera, la incorporación de sensores exclusivamente en la zona de generación de las burbujas y el uso de cámaras de alta velocidad y resolución, permitieron lograr una reconstrucción detallada de procesos elusivos, como la formación, crecimiento y desprendimiento de burbujas individuales. En este línea, Hutter y colaboradores [5, 1] lograron medir experimentalmente diámetro de burbujas en función del tiempo, frecuencia, diámetro de partida y tiempo de espera, en la ebullición de FC72 sobre obleas de silicio con un número reducido de cavidades microfabricadas.

Las características de estas mediciones, en las que se reducen las incertezas asociadas a la descripción de la superficie y se logra determinar con precisión aquellas características del flujo reproducibles con lattice Boltzmann, las convierten en un caso de validación ideal para el modelo propuesto en esta tesis. Por lo tanto, el presente capítulo estará dedicado a la reproducción del experimento de ebullición de Hutter mediante la aplicación del modelo y de la metodología de análisis desarrollada en los capítulos anteriores.

Decir en algún punto que se trata de ebullición nucleada

1.1. Descripción del experimento

El cuerpo principal del dispositivo experimental de Hutter [1] está compuesto por una cámara de ebullición de acero inoxidable, con cuatro ventanas de vidrio **borosilicato**, que permiten el acceso óptico al sustrato de ebullición. Esta cámara se encuentra recubierta con calefactores aislados con silicona que permiten reducir la pérdida de calor hacia el ambiente, y contiene cuatro cartuchos calefactores utilizados para la desgasificación del **boiling liquid** y para calefaccionarlo hasta alcanzar la temperatura de saturación. La cámara se encuentra conectada a un condensador externo, el cual es responsable de regular la presión del sistema mientras que permite la recuperación del líquido evaporado y su posterior regreso a la cámara principal.

El componente responsable de la ebullición consiste en un chip de silicio, construido

sobre una oblea de 3 pulgadas de diámetro y $380\ \mu\text{m}$ de espesor. En la Fig. 1.1 se esquematiza el proceso de construcción del chip: en uno de sus caras se produce una capa de dióxido de silicio que contiene en su interior a los sensores de temperatura y el circuito calefactor de Al, mientras que en la superficie restante se generan las microcavidades que actuarán como sitios de nucleación.

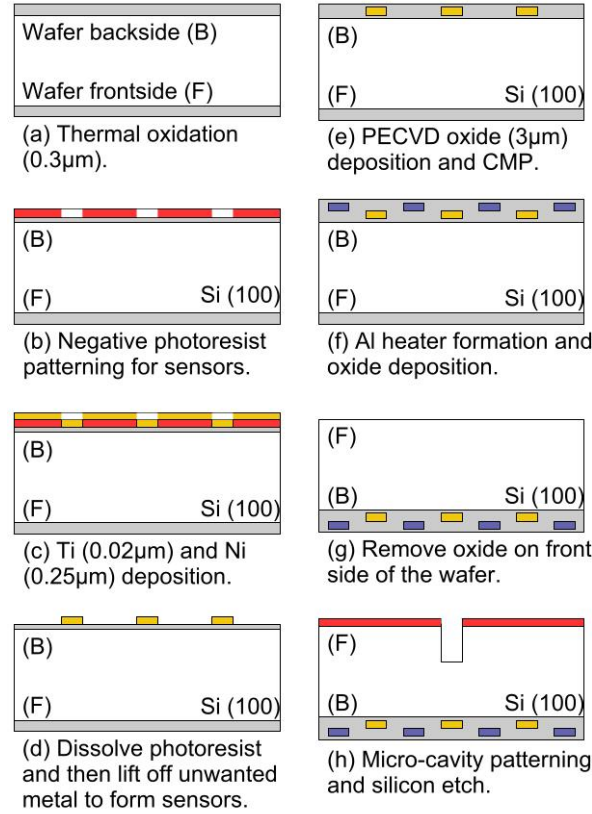


Figura 1.1: Secuencia de fabricación del chip de ebullición, que contiene las microcavidades, los sensores de temperatura integrados (amarillo), y la resistencia calefactora integrada (azul). Reimpreso de [1].

Las cavidades artificiales fueron generadas sobre la placa de silicio mediante un proceso de grabado profundo con iones activos (*deep reactive ion etching*), y corresponden a pequeños orificios de $40\ \mu\text{m}$ de profundidad y $10\ \mu\text{m}$ de diámetro. Como se muestra en la Fig. 1.2, esta técnica permite generar cavidades con formas precisas, claramente distinguibles de la rugosidad superficial del chip.

Boiling liquid

El fluido de trabajo utilizado fue perfluorohexano C_6F_{14} , conocido comercialmente como Fluorinert FC-72. Es un líquido claro, incoloro, térmica y químicamente estable, compatible con materiales sensibles, inflamable, poco tóxico y ampliamente utilizado en experimentos de ebullición. Su baja temperatura de ebullición ($T_{\text{sat}} = 57,15\ ^\circ\text{C}$ a 1 atm de presión) y sus propiedades dieléctricas permiten sumergir completamente las

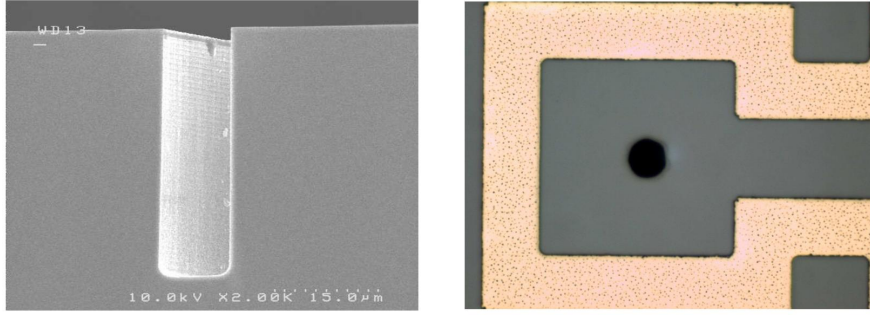


Figura 1.2: Izquierda: imagen SEM de una sección a través de una cavidad elongada. Derecha: imagen de la apertura de la cavidad.

conexiones eléctricas de la cámara y el chip calefactor. [Algo más](#)

El diámetro de las burbujas pudo ser medido a partir de imágenes capturadas por una cámara de alta velocidad, y corresponde al máximo diámetro aparente o ecuador de las mismas. En la Fig. 1.3 se muestra una secuencia de imágenes con una resolución temporal de 6 ms para el crecimiento de una burbuja en una cavidad de $80 \mu\text{m}$ de profundidad y $10 \mu\text{m}$ de diámetro, con un exceso de temperatura de 1.1 K en la superficie calefactora (respecto a la temperatura de saturación) y 1.25 atm de presión.

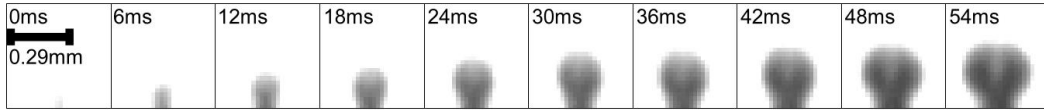


Figura 1.3: Imágenes de alta velocidad de la secuencia de crecimiento de una burbuja en una cavidad aislada.

1.2. Modelo numérico

1.2.1. Selección de los parámetros de simulación

Las mediciones realizadas por Hutter permitieron cuantificar la evolución del diámetro de burbuja aparente, desde la formación hasta el desprendimiento de cada burbuja individual, bajo condiciones de ebullición saturada de FC-72 a diferentes presiones. Sin embargo, como se detalla en el Capítulo ??, la naturaleza adimensional del formalismo utilizado no permite realizar una construcción directa del dominio computacional para este problema, sino que es necesario impulsar la elección de modelos computacionales que simulen los mismos números adimensionales representativos del experimento. De acuerdo a las ecuaciones recuperadas por las ELB, estos parámetros adimensionales corresponden a:

$$Re = \frac{\rho_l g^{1/2} D^{3/2}}{\mu_l}, \quad Bo = \frac{\rho_l g D^2}{\kappa}, \quad Pr = \frac{\nu}{\alpha}, \quad Ja = \frac{c_v}{h_{fg}}(T_w - T_s), \quad (1.1)$$

donde Re , Bo , Ja y Pr son los números de Reynolds, Bond, Jacob y Prandtl respectivamente. En la Ec. (1.1) D corresponde a una dimension característica, μ_l a la viscosidad dinámica de la fase líquida, κ a la tensión superficial, y T_w y T_s corresponden a la temperatura sobre la pared y en el seno del fluido, respectivamente.

Por otro lado, además de las ventajas provenientes de la adimensionalización, es necesario tener en cuenta la consistencia observada en las soluciones numéricas si se expresa en unidades adimensionales, ya que las interfases recuperadas tienen un espesor que depende de las constantes de estado, y que es fijo en unidades de grilla.

Estas condiciones, sumadas a la experiencia adquirida durante el desarrollo del modelo y las etapas previas de validación, llevan a proponer la realización de un conjunto de pasos previos a la simulación del experimento, con el objetivo de determinar las constantes de simulación decuadas. De esta manera, la evaluación preliminar para la simulación con modelos pseudopotential debe seguir el siguiente camino:

1. Selección de la ecuación de estado.
2. Cálculo de los números adimensionales del experimento.
3. Determinación de constantes de estado adecuadas.
4. Cálculo de tensión superficial recuperada.
5. Cálculo de calor latente recuperado.
6. Cálculo de factores de relajación y demás constantes de la simulación.
7. Revisión desde el paso 3 hasta encontrar una combinación de factores satisfactoria.

Selección de la ecuación de estado

Para esta etapa es necesario encontrar una ecuación de estado de reproduzca adecuadamente la curva de coexistencia ($T_r - \rho_r$) del FC-72. A diferencia de lo que ocurre con otros refrigerantes, las propiedades del FC-72 no se encuentran incluidas en bases de datos abiertas, por lo que se han extraído de la tesis de Geisler [6] y del trabajo de Cao [7]. En la Tabla ?? se resumen las características necesarias para la simulación, calculadas a temperatura de saturación (329,75 K) y presión atmosférica.

Propiedad	Notación	Valor (SI)
Temperatura de saturación	T_s	329,75 K
Temperatura de saturación reducida	T_{s_r}	0,73474
Densidad de líquida	ρ_l	1620 kg/m ³
Densidad de vapor	ρ_g	13,4 kg/m ³
Viscosidad de líquido	ν_l	$2,8025 \cdot 10^{-7}$ kg/(m s)
Viscosidad de vapor	ν_g	$8,9552 \cdot 10^{-7}$ kg/(m s)
Tensión superficial	σ_s	0,00827 N/m
Cond. térmica líquido	λ_l	0,0522 W/(m K)
Cond. térmica vapor	λ_l	0,0129 W/(m K)
Calor específico líquido	c_{v_l}	1098 J/(kg K)
Calor específico vapor	c_{v_g}	894 J/(kg K)
Calor latente	h_{fg}	84500 J/(kg K)

Tabla 1.1: Propiedades principales de FC-72 a $p = 1$ atm y $T = 329,75$ K.

Los experimentos analizados fueron realizados principalmente a presión atmosférica, de modo que el objetivo de esta etapa se reduce a identificar la ecuación de estado que mejor reproduce la relación de densidades a la temperatura reducida correspondiente a esta condición de saturación. En la Fig. 1.4 se muestran las curvas de coexistencia correspondientes a las ecuaciones de estado de van der Waals, Carnahan-Starling (Ec. (??)) y Peng-Robinson (Ec. (??)), junto con las densidades de coexistencia de FC-72 a presión atmosférica. En este caso, puede verse que la única ecuación capaz de producir satisfactoriamente las densidades de coexistencia a la temperatura deseada es la de Peng-Robinson, con un factor de excentricidad $\omega = 0,5$.

Números adimensionales del experimento

La determinación de los números adimensionales no es única, ya que depende, entre otros factores, de la elección de una longitud característica D . En este caso se desea reproducir la generación de burbujas en un único sitio de nucleación, empleando un dominio computacional prismático con el mayor tamaño posible, con el objetivo de reducir los efectos de la frontera sobre la dinámica de las burbujas. Por lo tanto, resulta natural tomar como D a alguna de las dimensiones principales de la microcavidad, como diámetro o profundidad. Sin embargo, una estimación preliminar de la cantidad necesaria de unidades de grilla para lograr una adecuada descripción de cada burbuja, muestra que con la capacidad de cálculo disponible para el desarrollo de esta tesis, no es posible discretizar adecuadamente la totalidad de la cavidad. Por lo tanto, se decide representar a D como el diámetro aparente de las burbujas, teniendo en cuenta

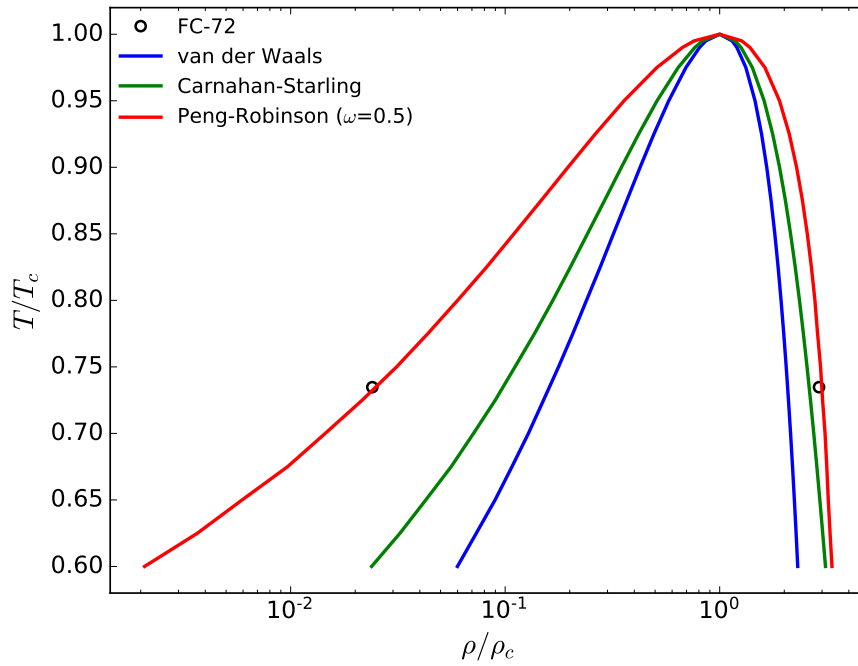


Figura 1.4: Ecuaciones de estado y densidades de coexistencia para FC72.

que, para las simulaciones, este parámetro es un resultado del cálculo y no un valor preestablecido.

Las mediciones de Hutter que serán empleadas en esta comparación muestran que el diámetro de partida observado es $D_p = 0,33$ mm, con lo que se obtienen los números adimensionales detallados en la Tabla 1.2

Re	66,998
Bo	0,20927
Pr	9,5497
Ja	0,016892

Tabla 1.2: Números adimensionales del experimento de ebullición de Hutter.

Determinación de las constantes de estado

En la Fig. 1.4 se observa que la ecuación de estado de Peng-Robinson con $\omega = 0,5$ es capaz de reproducir la relación de densidades requerida ($\rho_l/\rho_g = 120,9$) a una temperatura reducida cercana a la del experimento ($T_{sr} = 0,73474$). Específicamente, mediante un proceso de minimización puede verse que esta ecuación de estado alcanza la relación de densidades buscada para $T_r = 0,73438$.

Por otro lado, las curvas de coexistencia de la Fig. 1.4 están expresadas en unidades reducidas, lo que implica que aún es necesario elegir un conjunto de constantes (a , b) admisibles, es decir, que conduzcan a simulaciones estables. Como se mostró en las

Secciones ?? y ??, las constantes de estado determinan los valores absolutos de densidades y temperatura reproducidas (no reducidas), así como el espesor de la interfase en unidades de grilla. Por lo tanto, el criterio de selección para este problema consiste en elegir un conjunto de constantes que, para $T_r = 0,73438$, reproduzcan una interfase con 5-10 unidades de grilla.

La evaluación del perfil de densidad a través de la interfase se llevó a cabo en dominios similares a los usados para el cálculo de tensión superficial, simulando la evolución de una burbuja estacionaria de 100 u.g de diámetro dentro de una cavidad cúbica y periódica con $200 \times 200 \times 200$ u.g. Mediante este proceso se seleccionaron las constantes $a = 1/50$ y $b = 2/21$, las cuales reproducen una interfase de 9 u.g. con $\sigma = 0,125$, como se muestra en la Fig. 1.5.

[Insert Image Here]

Figura 1.5: Perfil de densidad a través de la interfase de una burbuja estacionaria, calculada para $T_r = 0,73438$ usando la ecuación de Peng-Robinson con $a = 1/50$, $b = 2/21$ y $\omega = 0,5$.

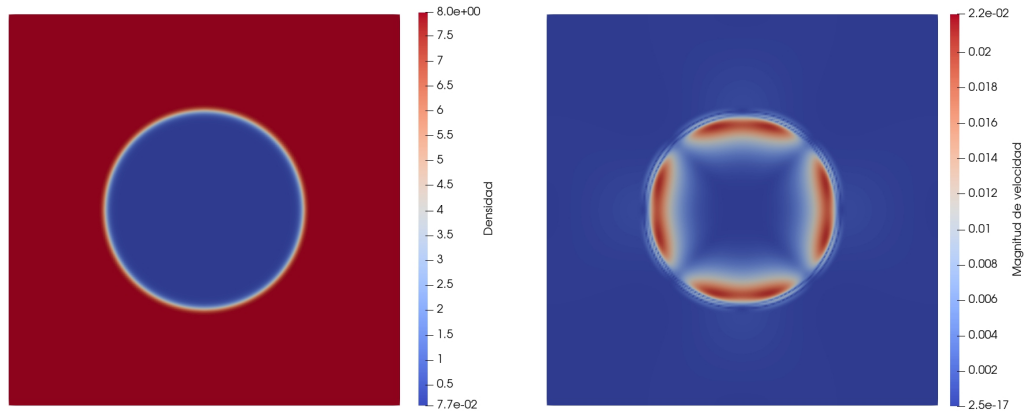
Cálculo de tensión superficial

Una vez definidas las constantes de la ecuación de estado, es posible determinar la tensión superficial recuperada mediante experimentos numéricos para evaluar la Ley de Laplace. Para ello, se simuló la evolución de burbujas estacionarias, ubicadas en el centro de una cavidad cúbica de $200 \times 200 \times 200$ u.g. con condiciones de contorno periódicas en todas sus caras. Inicialmente, estas burbujas están compuestas por un fluido de densidad ρ_g dentro de una matriz de densidad ρ_l , donde ρ_g y ρ_l corresponden a las densidades de coexistencia de las fases de vapor y líquido a T_r respectivamente.

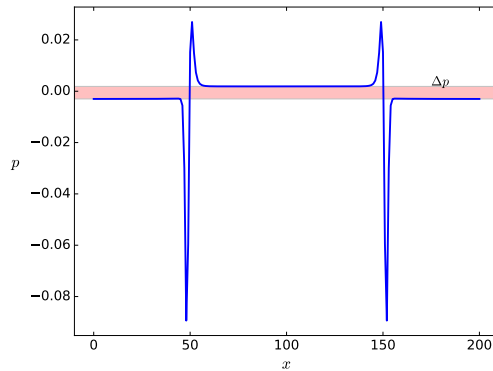
De acuerdo al modelo hidrodinámico de Xu la presión en cada nodo puede calcularse mediante la Ec. (??), de modo que si se simulan burbujas con diferente radio inicial, la tensión superficial puede calcularse usando una regresión lineal para la ecuación de Laplace:

$$\sigma_s = \frac{p_{in} - p_{out}}{2R}, \quad (1.2)$$

donde p_{in} y p_{out} corresponden al valor de presión en el interior y exterior de la burbuja respectivamente, lejos de la interfase. A modo de ejemplo, en la Fig. 1.6 se muestran los resultados de la evolución de la burbuja estacionaria, donde puede observarse la distribución de densidad inicial y final, así como el perfil de presión a lo largo de la dirección x , tomando como origen el centro de la burbuja.



(a) Densidad sobre un plano con origen en el centro de la burbuja. (b) Magnitud de velocidad sobre un plano con origen en el centro de la burbuja.



(c) Distribución de presión a través de una burbuja estacionaria.

Figura 1.6: Ejemplo de burbuja estacionaria empleada en la simulación de la ley de Laplace.

Bibliografía

- [1] Hutter, C., Kenning, D. B. R., Sefiane, K., Karayiannis, T. G., Lin, H., Cummins, G., *et al.* Experimental pool boiling investigations of FC-72 on silicon with artificial cavities and integrated temperature microsensors. *Experimental Thermal and Fluid Science*, **34** (4), 422–433, 2010. ix, 2, 3
- [2] Liang, G., Mudawar, I. Review of pool boiling enhancement by surface modification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **128**, 892–933, ene. 2019. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0017931018330321>. 1
- [3] Gregorčič, P., Zupančič, M., Golobič, I. Scalable Surface Microstructuring by a Fiber Laser for Controlled Nucleate Boiling Performance of High- and Low-Surface-Tension Fluids. *Scientific Reports*, **8** (1), 7461, dic. 2018. URL <http://www.nature.com/articles/s41598-018-25843-5>. 2
- [4] Liu, B., Liu, J., Zhang, Y., Wei, J., Wang, W. Experimental and theoretical study of pool boiling heat transfer and its CHF mechanism on femtosecond laser processed surfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **132**, 259–270, abr. 2019. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0017931018334318>. 2
- [5] Hutter, C. Experimental Pool Boiling Investigation of FC-72 on Silicon with Artificial Cavities, Integrated Temperature Micro-Sensors and Heater. Tesis Doctoral, The University of Edinburgh, 2009. 2
- [6] Larson Geisler, K. J. Buoyancy-driven two phase flow and boiling heat transfer in narrow vertical channels. PhD Thesis, University of Minnesota, 2007. 5
- [7] Cao, Z., Zhou, J., Wei, J., Sun, D., Yu, B. Experimental and numerical study on bubble dynamics and heat transfer during nucleate boiling of FC-72. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **139**, 822–831, ago. 2019. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0017931019302662>. 5

