

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)

4 de Noviembre 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
1.2.2. Esquema de fuerzas de interacción	13
1.2.3. Ángulo de contacto	14
1.3. Resultados	17
Bibliografía	19

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.	8
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 $\omega = 0,5$	9
1.6. Ejemplo de burbuja estacionaria empleada en la simulación de la ley de Laplace.	10
1.7. Experimento numérico de Ley de Laplace para diferentes valores de κ . .	11
1.8. Experimento numérico para la determinación del calor latente.	12
1.9. Corrientes espúreas en una burbuja estacionaria, obtenidas con diferentes representaciones de la fuerza de interacción.	14
1.10. Construcción de Maxwell obtenida con la fuerza de interacción de la Ec. (1.6) y $\beta = 1,25$	15
1.11. Interpretación de ángulo y línea de contacto en una interfase difusa . .	17

Índice de tablas

1.1. Números adimensionales del experimento de ebullición de Hutter. . . .	6
1.2. Propiedades principales de FC-72 a $p = 1$ atm y $T = 329,75$ K.	7
1.3. Constantes de simulación obtenidas como resultado del proceso de selección.	13

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.

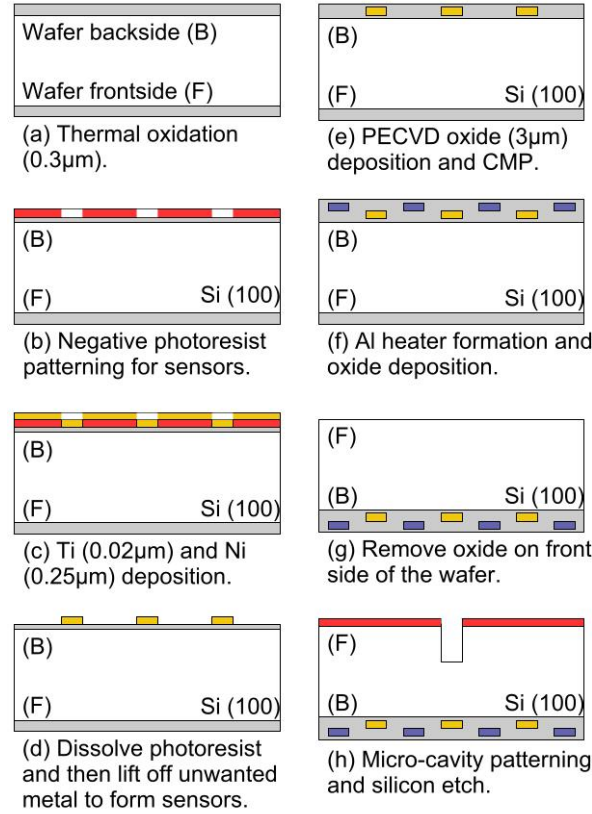


Figura 1.1: Secuencia de fabricación del chip de ebullición, que contiene las microcavidades, los sensores de temperatura integrados (amarillo), y la resistencia calefactora integrada (azul). Reimpreso de [1].

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

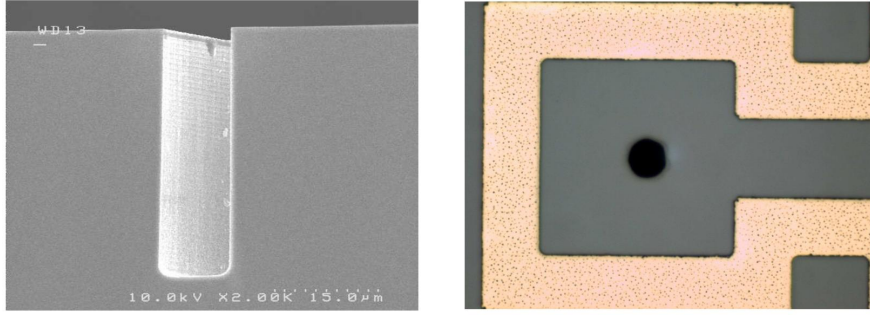


Figura 1.2: Izquierda: imagen SEM de una sección a través de una cavidad elongada. Derecha: imagen de la apertura de la cavidad.

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.

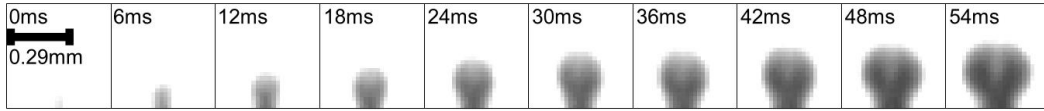


Figura 1.3: Imágenes de alta velocidad de la secuencia de crecimiento de una burbuja en una cavidad aislada.

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. 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.

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. Como en el modelo propuesto en el Capítulo ?? no es posible fijar el calor latente y tensión superficial, sino que corresponden a propiedades recuperadas dependientes de las demás constantes de simulación, puede usarse la Ec. (1.1) para fijar los parámetros restantes:

$$g = \frac{Bo\kappa}{\rho_l D^2}, \quad \nu_l = \frac{g^{1/2} D^{3/2}}{Re} = \sqrt{\frac{Bo\kappa D}{\rho_l Re^2}}, \quad \alpha = \frac{\nu}{Pr}, \quad c_v = \frac{Ja h_{fg}}{(T_w - T_s)}. \quad (1.2)$$

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. Cálculo de los números adimensionales del experimento.
2. Selección de la ecuación de estado.
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.

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 caracerística 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 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 1.1

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

Tabla 1.1: Números adimensionales del experimento de ebullición de Hutter.

Selección de la ecuación de estado

Para esta etapa es necesario encontrar una ecuación de estado que 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 1.2: 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 $\omega = 0,5$.

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 ($T_{s_r} = 0,73474$). 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

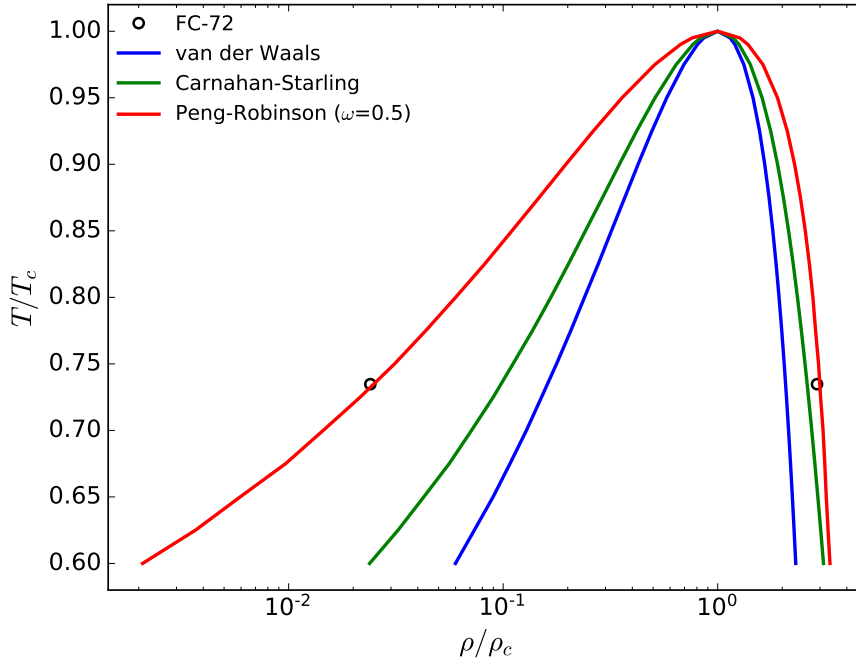


Figura 1.4: Ecuaciones de estado y densidades de coexistencia para FC72.

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.

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:

$$p_{in} - p_{out} = \frac{\sigma_s}{2R}, \quad (1.3)$$

[Insert Image Here]

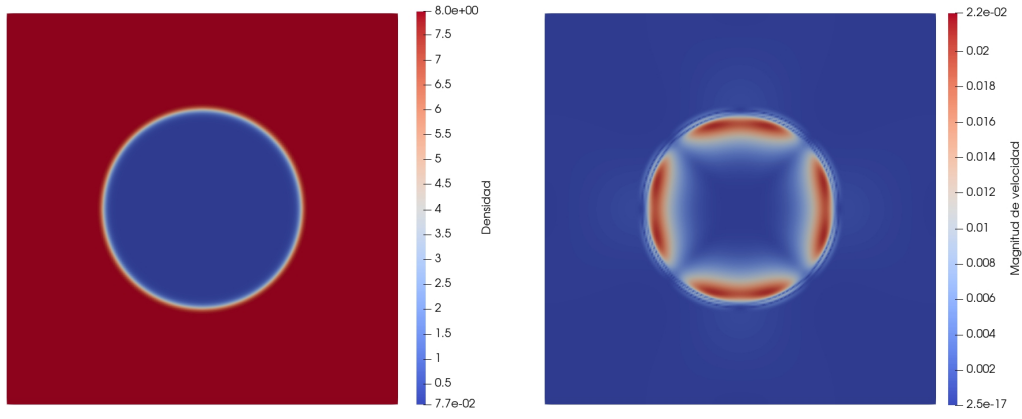
Figura 1.5: Perfil de densidad a través de la interfase de una burbuja estacionaria, calculada para $T_r = 0,73438$ usando la ecuación de Peng-Robinson con $a = 1/50$, $b = 2/21$ y $\omega = 0,5$.

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 final de densidad y magnitud de velocidad (en este caso son corrientes espúreas), así como el perfil de presión a lo largo de la dirección x , tomando como origen el centro de la burbuja.

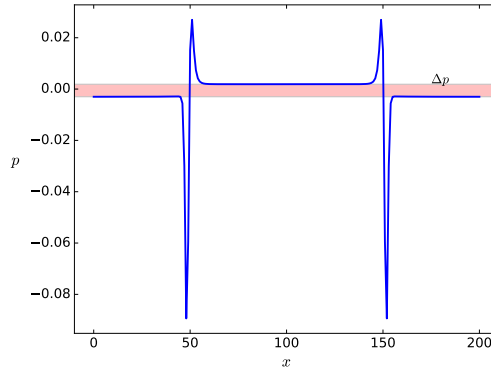
El esquema isotérmico de Xu incorpora un término de fuente adicional que permite modificar la tensión superficial recuperada mediante cambios en el parámetro libre κ . En la Fig. 1.7 se muestran los resultados del experimento numérico de Ley de Laplace, donde se deja evolucionar un conjunto de burbujas de diferente radio inicial y se mide la presión interna y externa después de alcanzado un estado estacionario. Como puede observarse, esta diferencia de presiones varía linealmente con $1/R$, donde R es el radio final medido para cada burbuja, y la pendiente de este ajuste (σ_s) depende del valor de κ utilizado.

El análisis de los números adimensionales de la Ec. (1.1) muestra que si se desea subir la viscosidad del fluido simulado para alejar a los factores de relajación de los límites de estabilidad, entonces es necesario incrementar los valores de tensión superficial recuperada. Por lo tanto, esto implica emplear un valor de κ negativo, con el mayor módulo posible. En este caso, con las constantes de estados previamente elegidas se alcanzaron simulaciones estables con $\kappa = -0,5$.

Los resultados que se observan en la Fig. 1.7 fueron obtenidos con los factores de



(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.

relajación que se detallan en la Tabla ??, con $\tau_\nu^{-1} = 1,0$. Sin embargo, es necesario destacar que a pesar que el modelo de Xu no produce desviaciones significativas en las densidades de coexistencia para diferentes valores de τ_ν , sí se han observado cambios en la tensión superficial recuperada. Por lo tanto, durante el proceso de selección de constantes de simulación adecuadas, debe repetirse este experimento si se modifican los factores de relajación.

Cálculo de calor latente recuperado

En los Capítulos ?? y ?? se verificó, mediante la simulación del problema de Stefan unidimensional, que el calor latente recuperado queda determinado por la ecuación de estado utilizada. Sin embargo, pueden surgir discrepancias con la solución analítica cuando se utilizan, por ejemplo, factores de relajación diferentes en cada fase (para cualquiera de las ELB). Por lo tanto, resulta conveniente medir el calor latente recuperado a través de un experimento numérico sencillo.

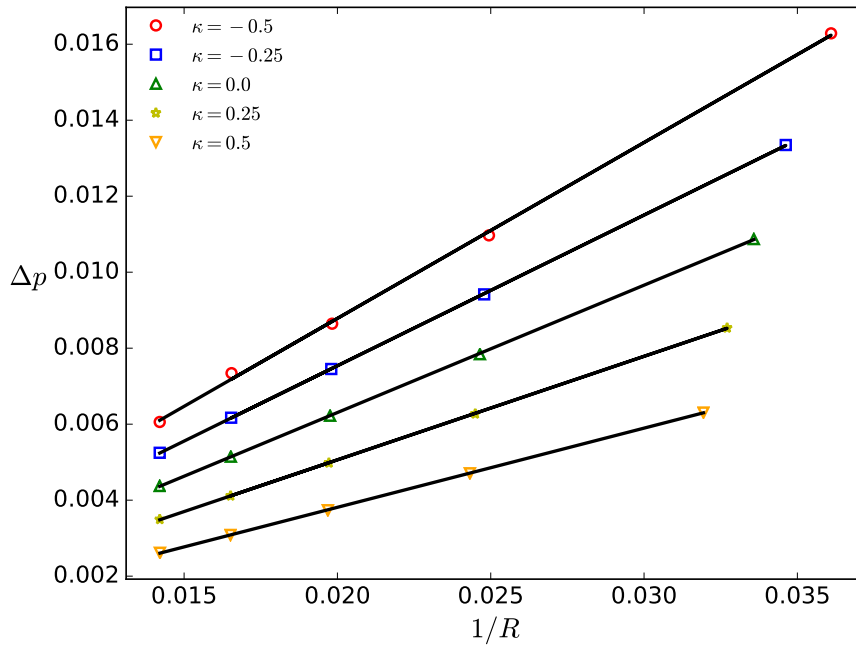


Figura 1.7: Experimento numérico de Ley de Laplace para diferentes valores de κ .

Tomando como base los trabajos de Fang [8] y Zhang [9], se eligió la construcción de un experimento numérico que consiste en un dominio de $L = 150$ u.g. en la dirección x y sólo $H = 3$ en las direcciones periódicas z e y , similar al empleado en la simulación del problema de Stefan. Sin embargo, a diferencia del frente de evaporación, el nuevo dominio contiene inicialmente un fluido en reposo a temperatura T_{sr} , con ρ_l para $x < 0,5L$ y ρ_v para $x > 0,5L$. Si en este caso se impone un flujo de calor constante en el extremo cerrado de la cavidad ($x = 0$), entonces es posible calcular el calor latente a partir de la medición del cambio de masa:

$$q = m'' h_{fg}, \quad (1.4)$$

donde q es la potencia entregada durante un cierto tiempo de simulación y m'' la masa de líquido evaporada durante ese período. De esta manera, puede obtenerse una estimación de h_{fg} mediante el ajuste lineal del cambio de masa obtenido para diferentes flujos de calor, como se ejemplifica en la Fig. 1.8. En este caso, el calor latente recuperado para $\tau_v^{-1} = 1,0$, $a = 1/50$ y $b = 2/21$ corresponde $h_{fg} = 0,26$, mientras que el analítico para la ecuación de Peng-Robinson [10] es de $h_{fg} = 0,24$.

Cálculo de factores de relajación y demás constantes de la simulación

Una vez determinadas aquellas propiedades macroscópicas recuperadas, como tensión superficial y calor latente, resta definir α_1 y α_2 para completar el cálculo de la difusividad térmica, y por lo tanto de q_χ necesario. Para ello, es necesario encontrar un

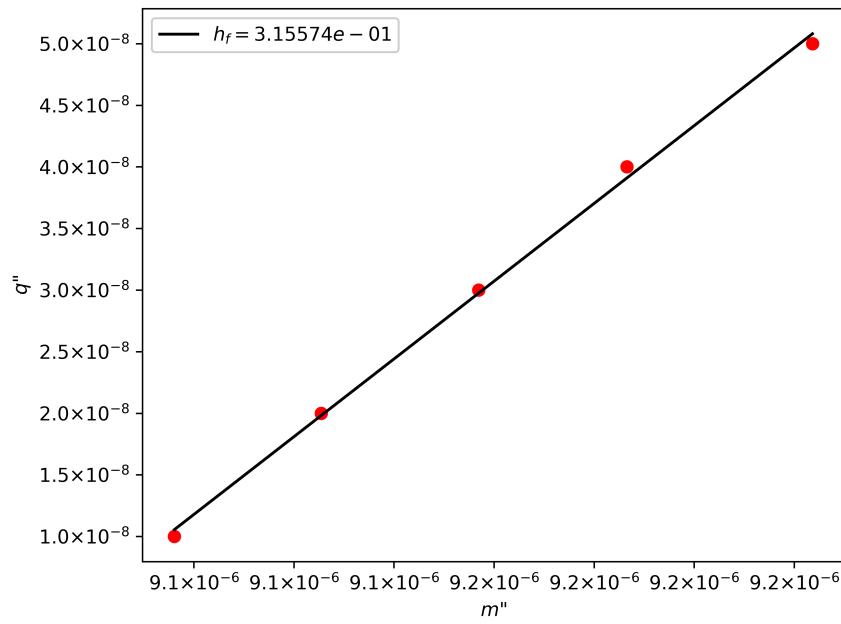


Figura 1.8: Experimento numérico para la determinación del calor latente.

conjunto que permita reducir q_χ todo lo posible, a la vez que produzca simulaciones estables. De esta manera, eligiendo un diámetro de partida que se desee simular, es posible completar el cálculo de las constantes de simulación.

En la Tabla 1.3 se reúnen las propiedades elegidas (superior) y calculadas (inferior) después del proceso de selección iterativo, destinadas a reproducir burbujas con diámetro de partida de 100 u.g.

Propiedad	Valor (u.g.)
D	100
a	1/50
b	2/21
α_1	-0,55
α_2	0,55
g	$1,2521 \cdot 10^{-6}$
$\tau_{\nu_l}^{-1}$	1,8178
$\tau_{\nu_g}^{-1}$	1,5149
q_{χ_l}	1,8815
q_{χ_g}	0,60417
c_v	51,504
q''	$4,9 \cdot 10^{-3}$

Tabla 1.3: Constantes de simulación obtenidas como resultado del proceso de selección.

1.2.2. Esquema de fuerzas de interacción

Como se mencionó en el Capítulo ??, el miembro derecho de la Ec. (??) equivale a la representación mediante diferencias finitas de $-\psi\nabla\psi$, aunque esta discretización no es única y sus variantes influyen de manera diferente en la estabilidad de una simulación. En particular, como $\psi\nabla\psi = 0,5\nabla^2\psi$, la fuerza de interacción puede calcularse alternativamente como [11]:

$$\mathbf{F}_i = -\frac{G}{2}c^2 \sum_{\alpha=1}^N \omega(|\mathbf{e}_\alpha|^2) \psi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t) \mathbf{e}_\alpha, \quad (1.5)$$

donde, a diferencia de la Ec. (??), la Ec. (1.5) sólo incluye la masa efectiva de los nodos vecinos. Diversos autores demostraron que una combinación de las Ecs. (??) y (1.5) puede extender el rango de temperaturas estables, disminuir las corrientes espúreas y reducir la inconsistencia termodinámica [12, 13]:

$$\mathbf{F}_i = -\beta \frac{G}{2}c^2 \sum_{\alpha=1}^N \omega(|\mathbf{e}_\alpha|^2) \psi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t) \mathbf{e}_\alpha - \frac{1-\beta}{2} G \psi(\mathbf{x}) c_s^2 \sum_{\alpha=1}^N \omega(|\mathbf{e}_\alpha|^2) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t) \mathbf{e}_\alpha, \quad (1.6)$$

donde el parámetro β puede ajustarse para lograr la mejora buscada. En el caso de ebullición de FC-72, la representación de la fuerza de interacción mediante la Ec. (1.6) no sólo reduce las corrientes espúreas sobre la interfase, sino que permite utilizar un

menor valor de κ en la Ec. (??) y, de esta manera, incrementar la tensión superficial recuperada. En la Fig. 1.9 se observan las corrientes espúreas observadas sobre una burbuja estacionaria con $D = 100$ u.g., similar a las utilizadas en la evaluación de la Ley de Laplace, pero calculadas con diferentes aproximaciones para la fuerza de interacción. En este caso, se evidencia que el empleo de la (1.6) con $\beta = 1,25$ y $\sigma = 0,09$ permite reducir la magnitud de las corrientes espúreas, para los mismos factores de relajación, constantes de estado y densidades de coexistencia.

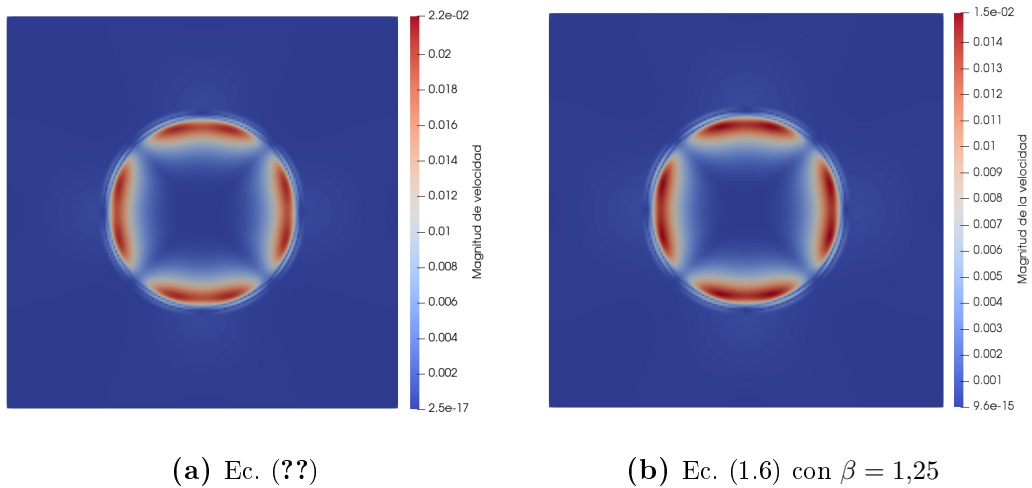


Figura 1.9: Corrientes espúreas en una burbuja estacionaria, obtenidas con diferentes representaciones de la fuerza de interacción.

El uso de una diferente aproximación para la fuerza de interacción junto con el modelo MRT de Xu implica que es necesario ajustar, de manera simultánea, a los parámetros σ y β . De esta manera, es posible lograr una disminución de las corrientes espúreas mientras que se logra una buena reproducción de la curva de coexistencia. En este caso, se observó que la reducción de las velocidades parásitas sobre la interfase es máxima para $\beta = 1,25$, pero esto implica utilizar $\sigma = 0,09$ para evitar inconsistencia termodinámica, tal como se observa en la Fig. 1.10

1.2.3. Ángulo de contacto

Hasta este punto, las simulaciones mostradas no incluyeron ningún análisis exhaustivo acerca de la interacción entre el fluido y las fronteras sólidas, ya que esta evaluación estuvo limitada a la aplicación de condiciones de contorno para la velocidad y temperaturas macroscópica. Sin embargo, la descripción microscópica de ebullición heterogénea requiere, además, de una representación adecuada de la interacción entre las interfases y las fronteras del dominio. Esta interacción puede cuantificarse a través del ángulo de contacto, que corresponde al ángulo en el cual la interfase fluido-fluido encuentra una fase sólida, y constituye una medida de la **mojabilidad** de la superficie. De esta forma,

[Insert Image Here]

Figura 1.10: Construcción de Maxwell obtenida con la fuerza de interacción de la Ec. (1.6) y $\beta = 1,25$

se considera que un fluido es **wetting** si el ángulo de contacto $\theta_c < 90^\circ$, y el mismo tiende a distribuirse como una lámina sobre la superficie sólida. Por otro lado, el fluido es **non-wetting** si $\theta_c > 90^\circ$, de modo que tiende a formar una gota sobre la superficie.

Esta interacción fluido-sólido y las consecuentes condiciones de mojabilidad pueden incorporarse de manera sencilla dentro de un modelo pseudopotential. Tradicionalmente, suele incorporarse una fuerza de adhesión entre el fluido y el sólido, que puede describirse mediante una forma general, similar a la de la fuerza de interacción [11]:

$$\mathbf{F}_{ads} = -G_w \psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^N w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) \psi(\rho_w) s_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t) \mathbf{e}_\alpha, \quad (1.7)$$

donde s_i es un indicador que vale 1 para los nodos sólidos y 0 para los de fluido. G_w y ρ_w pueden ajustarse de forma conjunta o independiente para alcanzar el ángulo de contacto deseado. Las numerosas variantes de esta técnica han sido aplicadas en la simulación de diversos problemas con interacción de gotas sobre superficies (ver por ejemplo [14, 15, 16]), o incluso en la evaluación de los efectos de mojabilidad en problemas simplificados de ebullición usando esquemas de lattice Boltzmann híbridos o con otros modelos de energía [17, 18, 19]. Sin embargo, como se destaca en el trabajo de Hu [20], este método de fuerza de adhesión sufre severas limitaciones relacionadas con la prescripción del ángulo de contacto y su influencia en la estabilidad global del modelo, lo que se refleja en la práctica en acotadas condiciones de aplicabilidad. Por un lado, la conocida dificultad de cuantificar *a priori* la tensión superficial entre el fluido

y la pared restringe la obtención de una expresión clara para describir el ángulo de contacto recuperado. Por otro lado, se pudo comprobar en las simulaciones de gotas estáticas sobre superficies planas que el incremento de la relación de densidades y el uso de bajas viscosidades (factores de relajación cercanos al límite de estabilidad) conducen a densidades recuperadas sobre la pared con valores diferentes a las de coexistencia, mientras que se producen deformaciones no deseadas en la forma de la gota sobre la región de contacto.

Las limitaciones inherentes a los modelos de fuerza de adhesión motivaron la incorporación de una representación geométrica del ángulo de contacto, similar a la utilizada por Wang [21] y Hu [20]. Esta descripción está basada en la formulación presentada por Ding y Spelt [22], desarrollada para investigar las condiciones de mojabilidad en modelos multifásicos de interfase difusa con líneas de contacto móviles, resueltos con técnicas de discretización tradicionales. En estos casos, la presencia de diferentes fases se describe a través de un parámetro de orden C , como la fracción de volumen de una de las fases. Como se ejemplifica en la Fig. 1.11, si los contornos del parámetro de orden son paralelos en la interfase, el vector normal a la misma (\mathbf{n}_s) puede escribirse en términos del gradiente de C como

$$\mathbf{n}_s = \frac{\nabla C}{|\nabla C|}. \quad (1.8)$$

En la línea de contacto, \mathbf{n}_s intersecta la frontera a un ángulo de $\pi/2 - \theta_c$, donde θ_c es el ángulo de contacto. Por lo tanto, este ángulo puede determinarse geométricamente como

$$\tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_c\right) = \frac{-\mathbf{n} \cdot \nabla C}{|\nabla C - (\mathbf{n} \cdot \nabla C)\mathbf{n}|} \quad (1.9)$$

La Ec. (1.9) puede incorporarse a un modelo pseudopotential a través del cálculo de densidad sobre las paredes. En particular, la fuerza de interacción (Ecs. (1.5) o (1.6)) sobre los nodos de la frontera puede obtenerse considerando la presencia de nodos fantasma, es decir, nodos que se encuentran dentro de la región sólida. En estos puntos, donde no está definida la función de distribución correspondiente, la densidad necesaria para el potencial de interacción puede estimarse mediante la Ec. (??), utilizando a la densidad del fluido como parámetro de orden y discretizando los gradientes mediante esquemas de diferencias finitas.

A modo de ejemplo puede considerarse una superficie plana con normal $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ y nodos con índices (i, j, k) . Usando esta notación, el nodo $(i, j, 1)$ se encuentra sobre la superficie y el nodo $(i, j, 0)$ dentro de la región sólida, por debajo de $(i, j, 1)$ a lo largo de la normal a la superficie. De esta manera, usando diferencias centradas de segundo orden para representar los gradientes de ρ , es posible reescribir la (1.9) para calcular explícitamente la densidad en el nodo fantasma $(i, j, 0)$, necesaria para obtener

un ángulo de contacto θ_c :

$$\rho_{i,j,0} = \rho_{i,j,2} + 2 \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_c\right) \sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)_{i,i,1}^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_{i,i,1}^2} \quad (1.10)$$

[Insert Image
Here]

Figura 1.11: Interpretación de ángulo y línea de contacto en una interfase difusa

1.3. Resultados

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. 6
- [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>. 6
- [8] Fang, W.-Z., Chen, L., Kang, Q.-J., Tao, W.-Q. Lattice Boltzmann modeling of pool boiling with large liquid-gas density ratio. *International Journal of Thermal*

- Sciences*, **114**, 172–183, abr. 2017. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1290072916310705>. 11
- [9] Zhang, C., Hong, F., Cheng, P. Simulation of liquid thin film evaporation and boiling on a heated hydrophilic microstructured surface by Lattice Boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **86**, 629–638, jul. 2015. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0017931015002872>. 11
- [10] Peng, D.-Y., Robinson, D. B. A New Two-Constant Equation of State. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, **15** (1), 59–64, feb. 1976. URL <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/i160057a011>. 11
- [11] Chen, L., Kang, Q., Mu, Y., He, Y.-L., Tao, W.-Q. A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **76**, 210–236, sep. 2014. 13, 15
- [12] Kupershtokh, A., Medvedev, D., Karpov, D. On equations of state in a lattice Boltzmann method. *Computers & Mathematics with Applications*, **58** (5), 965–974, sep. 2009. 13
- [13] Gong, S., Cheng, P. Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved lattice Boltzmann model for phase transitions and multiphase flows. *Computers & Fluids*, **53**, 93–104, ene. 2012. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793011002994>. 13
- [14] Li, Q., Luo, K. H., Kang, Q. J., Chen, Q. Contact angles in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of wetting. *Physical Review E*, **90** (5), nov. 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.053301>. 15
- [15] Xu, A., Zhao, T., An, L., Shi, L. A three-dimensional pseudo-potential-based lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio and variable surface tension. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, **56**, 261–271, dic. 2015. 15
- [16] Sbragaglia, M., Benzi, R., Biferale, L., Succi, S., Toschi, F. Surface Roughness-Hydrophobicity Coupling in Microchannel and Nanochannel Flows. *Physical Review Letters*, **97** (20), 2006. 15
- [17] Li, Q., Luo, K., Kang, Q., He, Y., Chen, Q., Liu, Q. Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. *Progress in Energy and Combustion Science*, **52**, 62–105, feb. 2016. 15
- [18] Ma, X., Cheng, P. Numerical Simulation of Complete Pool Boiling Curves: From Nucleation to Critical Heat Flux Through Transition Boiling to Film Boiling.

- Nuclear Science and Engineering*, **193** (1-2), 1–13, feb. 2019. URL <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00295639.2018.1504566>. 15
- [19] Guo, Q., Cheng, P. 3D lattice Boltzmann investigation of nucleation sites and dropwise-to-filmwise transition in the presence of a non-condensable gas on a biomimetic surface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **128**, 185–198, ene. 2019. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0017931018328485>. 15
- [20] Hu, A., Li, L., Uddin, R., Liu, D. Contact angle adjustment in equation-of-state-based pseudopotential model. *Physical Review E*, **93** (5), 053307, mayo 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.93.053307>. 15, 16
- [21] Wang, L., Huang, H.-b., Lu, X.-Y. Scheme for contact angle and its hysteresis in a multiphase lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, **87** (1), ene. 2013. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.013301>. 16
- [22] Ding, H., Spelt, P. D. M. Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion. *Physical Review E*, **75** (4), abr. 2007. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.75.046708>. 16

