

# Índice de contenidos

Definiciones, acrónimos y símbolos	v
Índice de contenidos	ix
Índice de figuras	xiii
Índice de tablas	xix
Resumen	xxi
Abstract	xxiii
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Estructura y alcance de esta tesis . . . . .	3
1.1.1. Aclaraciones sobre la notación . . . . .	4
<b>2. Fundamentos de lattice Boltzmann</b>	<b>5</b>
2.1. Naturaleza cinética del método . . . . .	6
2.1.1. Función de distribución de equilibrio . . . . .	7
2.1.2. La ecuación de Boltzmann . . . . .	7
2.1.3. Ecuaciones de conservación macroscópicas . . . . .	8
2.2. Discretización del espacio de velocidades . . . . .	10
2.2.1. Adimensionalización . . . . .	11
2.2.2. Expansión en series de Hermite . . . . .	11
2.2.3. Discretización de la función de distribución de equilibrio . . . . .	14
2.2.4. Discretización de la función de distribución . . . . .	15
2.2.5. Conjunto discreto de velocidades . . . . .	15
2.3. Discretización del espacio y tiempo . . . . .	17
2.4. Operadores de colisión . . . . .	18
2.4.1. Operador BGK . . . . .	19
2.4.2. Operador MRT . . . . .	19
2.5. La expansión de Chapman-Enskog . . . . .	22

2.6.	Lattice Boltzmann como método numérico . . . . .	23
2.7.	Conclusiones . . . . .	26
<b>3.</b>	<b>Simulación de flujo multifásico isotérmico</b>	<b>29</b>
3.1.	Lattice Boltzmann para flujo multifásico . . . . .	30
3.1.1.	Modelo de gradiente de color . . . . .	31
3.1.2.	Modelo de energía libre . . . . .	31
3.1.3.	Modelo <i>phase-field</i> . . . . .	32
3.1.4.	Modelo pseudopotencial . . . . .	33
3.1.5.	Resumen de los métodos principales . . . . .	34
3.2.	El modelo pseudopotencial . . . . .	35
3.2.1.	Ecuaciones de estado y la regla de construcción de Maxwell . . .	36
3.2.2.	Incorporación de ecuaciones de estado en el potencial de interacción	40
3.2.3.	La condición de estabilidad mecánica y el problema de inconsis- tencia termodinámica . . . . .	41
3.2.4.	Propiedades recuperadas: tensión superficial . . . . .	43
3.3.	El modelo isotérmico de Li et al. . . . .	44
3.3.1.	Condiciones de contorno . . . . .	47
3.4.	Validación . . . . .	49
3.4.1.	Construcción de Maxwell . . . . .	49
3.4.2.	Estratificación de un fluido van der Waals . . . . .	52
3.5.	Conclusiones . . . . .	66
<b>4.</b>	<b>Transferencia de calor en flujo multifásico bidimensional</b>	<b>69</b>
4.1.	Transporte de calor en lattice Boltzmann . . . . .	69
4.2.	Ecuación de energía con operador MRT . . . . .	72
4.2.1.	Condiciones de contorno . . . . .	84
4.3.	Validación del modelo . . . . .	84
4.3.1.	Estratificación de un fluido van der Waals . . . . .	85
4.3.2.	Frente de evaporación . . . . .	90
4.3.3.	Ebullición heterogénea . . . . .	93
4.4.	Evaluación cualitativa de ebullición sobre superficies planas . . . . .	103
4.5.	Conclusiones . . . . .	106
<b>5.</b>	<b>Transferencia de calor en flujo multifásico tridimensional</b>	<b>109</b>
5.1.	Esquema MRT para ecuaciones hidrodinámicas . . . . .	109
5.1.1.	Condiciones de contorno . . . . .	113
5.2.	Esquema MRT para la ecuación de energía . . . . .	115
5.2.1.	Cálculo del término de fuente . . . . .	124
5.3.	Validación del modelo . . . . .	125

---

5.3.1.	Construcción de Maxwell . . . . .	126
5.3.2.	Estratificación de un fluido van der Waals . . . . .	129
5.3.3.	Frente de evaporación . . . . .	133
5.4.	Conclusiones . . . . .	136
<b>6.</b>	<b>Simulación de ebullición en FC-72</b>	<b>137</b>
6.1.	Elección de un experimento de ebullición . . . . .	138
6.1.1.	Descripción del experimento . . . . .	139
6.1.2.	Mediciones principales . . . . .	140
6.2.	Construcción del modelo computacional . . . . .	141
6.2.1.	Esquema de fuerzas de interacción . . . . .	141
6.2.2.	Ángulo de contacto . . . . .	143
6.2.3.	Metodología propuesta para la selección de los parámetros de simulación . . . . .	146
6.2.4.	Modelo computacional final . . . . .	154
6.3.	Resultados . . . . .	156
6.4.	Conclusiones . . . . .	164
<b>7.</b>	<b>Descripción general de las herramientas numéricas</b>	<b>167</b>
7.1.	Estructura general del proyecto . . . . .	168
7.2.	Malla . . . . .	171
7.2.1.	Generación de malla . . . . .	171
7.2.2.	Paralelización . . . . .	172
7.3.	Campos y variables . . . . .	174
7.4.	Ecuaciones . . . . .	175
7.5.	Implementación en CUDA . . . . .	176
7.6.	Listado completo de funcionalidades . . . . .	178
7.6.1.	Resolutores o <i>solvers</i> . . . . .	178
7.6.2.	Generadores de malla . . . . .	178
7.6.3.	Fuerzas . . . . .	179
7.6.4.	Ecuaciones de estado . . . . .	180
7.6.5.	Fuentes de calor . . . . .	180
7.6.6.	Campos . . . . .	180
7.6.7.	Ecuaciones de LB . . . . .	180
7.6.8.	Condiciones de contorno . . . . .	181
7.6.9.	Factores de relajación . . . . .	181
<b>8.</b>	<b>Conclusiones generales</b>	<b>183</b>
8.1.	Trabajos futuros . . . . .	187

Bibliografía	189
A. Publicaciones asociadas a esta tesis	201
Agradecimientos	203