

M. en C. JOSÉ ANTONIO QUEVEDO TIZNADO

MODELACIÓN DEL PROCESO DE ROMPIMIENTO DE GOTA EN
EMULSIONES DURANTE EL FLUJO A TRAVÉS DE CAPILARES CON
CONSTRICCIÓN



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería

MODELACIÓN DEL PROCESO DE ROMPIMIENTO DE
GOTA EN EMULSIONES DURANTE EL FLUJO A
TRAVÉS DE CAPILARES CON CONSTRICCIÓN

TESIS

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de

DOCTORADO EN INGENIERÍA

Presenta:

M. en C. José Antonio Quevedo Tiznado

Dirigida por:

Dr. Carlos Fuentes Ruiz

C.U., Santiago de Querétaro, Qro.

Noviembre del 2017



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería
Doctorado en Ingeniería

MODELACIÓN DEL PROCESO DE ROMPIMIENTO DE GOTA EN EMULSIONES DURANTE EL FLUJO A TRAVÉS DE CAPILARES CON CONSTRUCCIÓN

TESIS

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de:

Doctorado en Ingeniería

Presenta:

M. en C. José Antonio Quevedo Tizado

Dirigido por:

Dr. Carlos Fuentes Ruiz

SINODALES

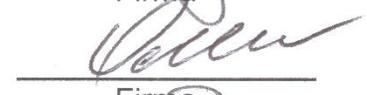
Dr. Carlos Fuentes Ruiz
Presidente


Firma

Dr. Enrique González Sosa
Secretario


Firma

Dra. Klavdia Oleschko Lutkova
Vocal

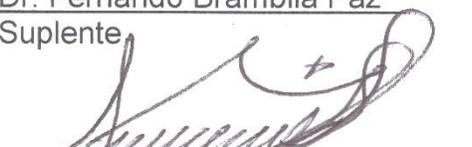

Firma

Dr. Carlos Alberto Chávez García
Suplente


Firma

Dr. Fernando Brambila Paz
Suplente

Firma


Dr. Aurelio Domínguez González
Director de la Facultad


Dra. Ma. Guadalupe Flavia Loarca Piña
Directora de Investigación y Posgrado

RESUMEN

Durante el flujo bifásico inmiscible en medios porosos, cuando el fluido mojante es desplazado por otro fluido en un capilar con constricción, la fase desplazada deja una película delgada en la pared, la cual puede aumentar su espesor y romper la continuidad de la otra fase. Este fenómeno es conocido como rompimiento de gota o *snap-off*, y es uno de los principales mecanismos de formación de emulsiones dentro del medio poroso. En esta tesis se analiza teórica y experimentalmente el rompimiento de gota durante el flujo a través de capilares con constricción en sistemas que involucran líquidos y gases. El enfoque teórico aquí planteado se divide en dos temas principales: uno es la resolución de modelos matemáticos que describen la evolución de la interfase entre los fluidos hasta que ocurre el rompimiento de gota; el otro consiste en la determinación *a priori*, mediante los llamados criterios de ruptura, de las condiciones de flujo en las que ocurre o se inhibe el rompimiento de gota. Para el primer planteamiento se propone un marco de trabajo basado en métodos pseudo-espectrales de series de Fourier con el que son resueltos los modelos de rompimiento de gota para diferentes tipos de interfaces. Los resultados de la modelación matemática utilizando este marco de trabajo unificador concuerdan aceptablemente con los reportados en la literatura. En cuanto a los criterios de ruptura, se establecieron formulaciones empíricas para condiciones dinámicas de flujo basadas en el análisis del número capilar límite, en el cual se inhibe el *snap-off*, considerando el efecto que tiene en éste la tasa de viscosidades. Por otra parte, se expone la metodología con la que se realizaron una serie de experimentos de microfluídica, consistentes en la inyección de emulsiones monodispersas (aceite / agua) a través de un microdispositivo transparente formado de una red de microcanales cilíndricos, el cual es monitoreado con un microscopio óptico con cámara digital de alta velocidad. Se presentan los resultados de diferentes casos de estudio definidos por la relación del tamaño de gota con el tamaño de las constricciones del medio, bajo el mismo régimen de flujo e igual concentración.

(Palabras clave: flujo a escala de poro, microfluídica, criterio dinámico de ruptura de gota, métodos pseudo-espectrales)

SUMMARY

During the immiscible two-phase flow in porous media, when the wetting fluid is displaced by another fluid in a constricted capillary, the displaced phase leaves a thin film in the wall, which can increase its thickness and break the continuity of the other phase. This phenomenon is known as drop breakup or snap-off, and is one of the main mechanisms of emulsion formation within the porous medium. In this thesis, the drop breakup during the flow through capillaries with constriction in systems involving liquids and gases, is analyzed theoretical and experimentally. The theoretical approach proposed here is divided into two main themes: one is the resolution of mathematical models that describe the evolution of the interface between the fluids until the snap-off is achieved; the other consists of a priori determination, by means of the so-called breakup criteria, of the flow conditions in which the snap-off occurs or is inhibited. For the first approach, we propose a framework based on pseudo-spectral methods of Fourier series with which the models for drop breakup are solved for different types of interfaces. The results of the mathematical modeling, using this unifying framework, agree acceptably with the reported in the literature. Regarding the breaking criteria, empirical formulations were established for dynamic flow conditions based on the analysis of the capillary number upper limit, in which the snap-off is inhibited, considering the effect of the viscosity ratio. On the other hand, the methodology with which a series of microfluidic experiments were carried out, consisting of the injection of monodisperse emulsions (oil / water) through a transparent microdevice formed by a network of cylindrical microchannels, which is monitored with an optical microscope with a high-speed digital camera. The results of different case studies are presented, which are defined by the relation of the drop size with the size of the constrictions of the medium, under the same flow regime and the same concentration.

(Keywords: pore scale flow, microfluidics, dynamic snap-off criteria, pseudo-spectral methods)

DEDICATORIAS

A mi abuelo, Daniel Tiznado
(1932-2016)

In memoriam

AGRADECIMIENTOS

A México, que a través del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y de la Universidad Autónoma de Querétaro (UAQ) financió y me permitió realizar esta investigación.

A mi director de tesis, el Dr. Carlos Fuentes Ruiz, por sus enseñanzas y consejos, por los que siempre le estaré agradecido.

A la Dra. Klavdia Oleschko Lutkova, líder del proyecto “Yacimiento Petrolero como un reactor fractal”, quien me otorgó la oportunidad de ser parte de tan importante investigación y de la cual surgió el interés por este tema de tesis. Encuentre aquí, doctora, mis más profundos agradecimientos por el honor que me concede al ser parte de este jurado.

Al Dr. Enrique González Sosa, por sus valiosos comentarios y sugerencias que permitieron mejorar este trabajo.

Al Dr. Carlos Alberto Chávez García, por el apoyo brindado a esta tesis y por alentarme a mejorar siempre mi trabajo.

Al Dr. Fernando Brambila Paz, profesor Investigador de la Facultad de Ciencias de la UNAM, por su revisión a este trabajo y aceptar formar parte del jurado.

Al Dr. Márcio da Silveira Carvalho, líder del Laboratorio de Microhidrodinámica y Medios Porosos, con sede en el departamento de Mecánica de la Pontificia Universidad Católica de Río de Janeiro, Brasil, quien me permitió realizar una estancia de investigación en su laboratorio como uno más de su excepcional grupo de trabajo.

A mis profesores del Doctorado en Ingeniería, por sus enseñanzas con las que contribuyeron a mi formación. Mención especial me merece el Dr. Salvador Echeverría por las interesantes discusiones dentro y fuera del aula.

A mis compañeros que fueron cómplices de sueños en este proyecto: Andras, Marilú, Perla, JuanMa y Natalia; gracias por los agradables momentos compartidos. También, a mis compañeros del laboratorio de Hidráulica, algunos ocasionalmente mis alumnos, por hacer más leves las intensas jornadas en la UAQ; me refiero a Celic, Dany, Edgar, Eduardo, Eli, Fer, Isra, Jaime, Jess, Jorge, Katia, Luis, Mabel, Marce, Memo, Miriam, Nadia, Raisa, Raúl y Samuel.

Também quero agradecer aqueles pessoas que me fizeram sentir em casa quando eu estava a milhares de quilômetros de distância do meu país, isto é, meus colegas do LMMP: Ademir, Ana Mehl, Ana Paula, Azar, Danmer, Débora, Felicle, Fred, Glauca, Iván, Jorge, José Ángel, José Francisco, Leonardo, Luan, Nicolle, Maria, Marisa, Patrick, Paula, Paulo, Pedro, Ranena, Ricardo, Rodrigo Bento, Rodrigo Cid, Sergio, Tiago, Tálita e Wynter. Forte abraço galerinha!

Quiero agradecer a mis padres, Antonio Quevedo y Ana Tiznado; a mis hermanos, Anayenci y Luis Daniel; y a mis sobrinos, Ana Victoria, Danixch e Isabella; por su constante aliento, por su amor y por su comprensión. Sin ustedes no hubiera sido posible obtener la fuerza y la motivación para culminar este proyecto.

Por último, y dejando un poco de lado las formalidades propias de alumno – profesor, quisiera utilizar este espacio para expresar mi mayor gratitud al ya mencionado, Dr. Carlos Fuentes, quien ha sido una fuerte influencia en mi persona, a quien admiro por su grandeza de espíritu y sus grandes conocimientos, pero sobre todo por su gentileza. Doc, mis profundos agradecimientos por mostrarme el lado bello de la ciencia. Es justo decir que en el transcurrir de estos años que abarcaron mi proceso doctoral, y ya mucho antes, usted fungió como Virgilio ante quien intento ser un Dante no tan malo. Tengo muy grabadas aquellas largas charlas, observaciones y consejos, alentándome siempre a mejorar en todos los aspectos de mi vida. Vienen a mi mente, por ejemplo, aquellos tiempos en que terminaba mi maestría y surgía ante mí un panorama pesimista, producto de la lectura abrumadora de la realidad del país, ante lo cual recibí su oportuno consejo, que me animó a retomar la trinchera de la ciencia y seguir escalando sus peldaños:

*“Y dijo el maestro:
Conviene ahora que te sacudas la pereza, porque no se alcanza la fama descansando
entre plumas y colchas. Tenemos aún que subir una escalera más larga; no basta
haberse alejado de aquellos. Si bien me entiendes, que mi consejo te sirva de ayuda.”*

*Dante Alighieri, La Divina Comedia
(Infierno, Canto XXIV)*

Después, ya iniciado el proyecto doctoral, librados ya algunos círculos (semestres) del inframundo, se hacía ineluctable la separación: culminó su exilio, usted regresaba a continuar su labor científica cerca de casa y yo me iba de estancia -“otras tierras del mundo reclamaban el concurso de mis modestos esfuerzos”. Sin embargo, dichas circunstancias no impidieron que siguiera contando con su valiosa dirección:

*“¿Por qué desconfías aún? ¿Crees que no sigo contigo y que no te guío?
Dante, el que de mí no haya sombra alguna, no debe maravillarte más
que al ver cómo los cielos no impiden que la luz de uno pase a través de los otros.”*

(Purgatorio, Canto III)

Y bien, todo este trayecto, en el que me acompañó para alcanzar el más alto grado que puede otorgarse en los estudios formales, fue, en cierta forma, similar a la travesía que describe Dante en su, antes referido, épico poema. Entonces, como bien lo sabe, no estuvo exento de grandes aprendizajes, vicisitudes, contradicciones, de grandes alegrías y algunas tristezas, desesperanza y euforia, de luchas contra (mis) demonios para acercarme un poco a la felicidad del *Paraíso* (lo que sea que esto signifique). Al igual que sucede en algún punto de *La Divina Comedia*, en el que Virgilio no puede ir más al lado de Dante en su peregrinar, se llegó el momento de seguir solo mi camino, sépalo, Doc, “que lo hago con una mezcla de alegría y de dolor”:

*“Cuando hubimos recorrido toda la escala [...], estando nosotros en el escalón más alto,
Virgilio fijó en mí sus ojos y dijo:
Has visto, hijo mío, el fuego temporal y el eterno; y has llegado a un lugar donde
por mí mismo no puedo ver más. Te he traído hasta aquí con ingenio y con arte;
ahora ten por guía tu placer; fuera estás de los caminos difíciles y de las angosturas.
[...] No esperes mis palabras ni mi gesto; tu arbitrio es libre, recto y sano, y sería un
error no obrar según su principio, y por ello pongo sobre tu cabeza la corona y la mitra.”*

(Purgatorio, Canto XXVII)

ÍNDICE GENERAL

RESUMEN	i
SUMMARY	ii
DEDICATORIAS	iii
AGRADECIMIENTOS	iv
ÍNDICE GENERAL	vi
ÍNDICE DE FIGURAS	ix
ÍNDICE DE TABLAS	xiv
LISTA DE ABREVIATURAS	xv
RELACIÓN DE VARIABLES	xvi
I. INTRODUCCIÓN	1
1.1 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA	2
1.2 JUSTIFICACIÓN	4
1.3 HIPÓTESIS Y OBJETIVOS	6
1.3.1 HIPÓTESIS	6
1.3.2 OBJETIVO GENERAL	6
1.3.3 OBJETIVOS PARTICULARES	6
1.4 CONTENIDO DE LA TESIS	7
II. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA	8
2.1 CONCEPTOS BÁSICOS DEL FLUJO BIFÁSICO A ESCALA DE PORO	8
2.1.1 FENÓMENOS INTERFACIALES	8
2.1.2 NÚMERO CAPILAR	10
2.2 EMULSIONES EN EL MEDIO POROSO	11
2.2.1 FORMACIÓN DE EMULSIONES POR ROMPIMIENTO DE GOTA	12
2.2.2 FLUJO DE EMULSIONES COMO MECANISMO DE RECUPERACIÓN MEJORADA	16
2.3 GRUPOS DE INVESTIGACIÓN	19
2.4 RESUMEN DEL CAPÍTULO	20

III. FORMULACIÓN MATEMÁTICA	21
3.1 GEOMETRÍA DEL PROBLEMA	21
3.2 MODELOS DE ROMPIMIENTO DE GOTA	23
3.2.1 MODELO DE GAUGLITZ Y RADKE (GR) PARA INTERFASE GAS-LÍQUIDO	24
3.2.2 MODELO DE HOYER (HE) PARA INTERFASE GAS-LÍQUIDO ELÁSTICA	27
3.2.3 MODELO DE BERESNEV Y DENG (BD) PARA INTERFASE LÍQUIDO-LÍQUIDO	30
3.2.4 CONDICIONES INICIALES Y DE FRONTERA	33
3.3 RESUMEN DEL CAPÍTULO	35
IV. MÉTODOS NUMÉRICOS	37
4.1 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA RESOLVER LOS MODELOS DE ROMPIMIENTO DE GOTA	37
4.1.1 MATRIZ DE DIFERENCIACIÓN CON DIFERENCIAS FINITAS	38
4.1.2 MÉTODO DE LÍNEAS	42
4.1.3 DIFERENCIACIÓN PSEUDO-SPECTRAL DE FOURIER	43
4.2 NÚMERO CAPILAR LÍMITE (Ca_{LIM})	46
4.2.1 MODELO EMPÍRICO DE Ca_{LIM} POR AGRUPACIÓN ENTORNO A $\tilde{\alpha}$	47
4.3 RESUMEN DEL CAPÍTULO	50
V. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	52
5.1 MODELACIÓN DEL ROMPIMIENTO DE GOTA	52
5.1.1 ROMPIMIENTO DE GOTA EN INTERFASES GAS- LÍQUIDO	53
5.1.2 ROMPIMIENTO DE GOTA EN INTERFASES ELÁSTICAS LÍQUIDO-GAS	53
5.1.3 ROMPIMIENTO DE GOTA EN INTERFASES LÍQUIDO-LÍQUIDO	55
5.2 EFFECTO DE LA RAZÓN DE VISCOSIDADES EN EL ROMPIMIENTO DE GOTA	57
5.2.1 EFFECTO DE LA RAZÓN DE VISCOSIDADES EN Ca_{LIM}	58
5.2.2 EFFECTO DE LA RAZÓN DE VISCOSIDADES EN EL TIEMPO DE RUPTURA	59
5.2.3 CRITERIO DE RUPTURA PARA CONDICIONES DINÁMICAS DE FLUJO	63
5.3 RESUMEN DEL CAPÍTULO	69
VI. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	71
LITERATURA CITADA	75
A. ANEXOS	79

A.1	EXPERIMENTOS DE MICROFLUÍDICA	79
A.1.1	FORMACIÓN DE EMULSIONES MONODISPERSAS	79
A.1.2	FLUJO DE EMULSIONES EN UN MEDIO POROSO BIDIMENSIONAL	88
A.1.3	RESULTADOS OBTENIDOS	94

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura		Página
Figura 2.1	Efectos de la mojabilidad de la fase sólida en el ángulo de contacto de una gota de aceite (en verde) sumergida en agua (azul) a) En una superficie mojabable por agua, el ángulo de contacto, θ , es aproximadamente cero b) Para una mojabilidad intermedia el ángulo de contacto está determinado por el balance de fuerzas del contacto trifásico c) La gota tiende a extenderse en una superficie mojabable por aceite formando un ángulo, θ , cercano a 180° [modificada de Abdallah <i>et al.</i> (2007)] .	10
Figura 2.2	Esquema de gargantas de poro en la estructura del medio poroso y modelo físico de tubos capilares (modificada de Peixoto, 2011).	12
Figura 2.3	Mecanismo de rompimiento de gota.	13
Figura 3.1	Esquema geométrico de capilares circulares con constricción y configuración de las fases líquidas. Los elementos geométricos principales son el radio del capilar, R_T ; el radio de garganta, R_g ; la longitud entre capilares, ℓ . La configuración de las fases consiste en un flujo núcleo-anular, en el que la fase externa (con índice 2), de espesor constante δ y viscosidad μ_2 , moja a la pared del poro, esta última descrita por $\lambda(x)$; y la fase interna, de viscosidad μ_1 , es rodeada por la fase externa, con la cual comparte la interfase $\kappa(x,t)$. Adicionalmente se esquematizan algunas variables de interés, como son la pendiente de la pared de poro, α , y el gradiente geométrico, $\tilde{\alpha}$. El flujo volumétrico, Q , se considera de izquierda a derecha.	22
Figura 4.1	Diagrama de flujo para la obtención de la diferenciación espectral de Fourier de una función periódica de N puntos par y periódica, utilizando los algoritmos de FFT y IFFT (Cooley y Tukey, 1965).	46
Figura 4.2	Gráfica de los valores del límite superior del número capilar en que se inhibe el rompimiento de gota (Ca_{lim}) dada una razón de	

radios, a , y longitud adimensional de poro, L ; para una razón de viscosidades de $k = 1.00$. Se muestran simultáneamente las rectas de ajuste que agrupan, con respecto a L , los valores de Ca_{lim} entorno a un mismo valor de gradiente geométrico, $\tilde{\alpha}$. 49

Figura 5.1 Perfiles de la evolución de la interfase gas-líquido obtenidos mediante la solución del modelo GR con el método PEF y su comparación con los reportados por Gauglitz y Radke (1990) con EF-G, para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$ y $Ca = 8.94 \times 10^{-4}$. Se muestran los resultados a diferentes tiempos adimensionales: $\tau = 1500$ — ; $\tau = 3000$ — ; $\tau = 5300$ — . 54

Figura 5.2 Perfiles de la evolución de la interfase gas-líquido obtenidos mediante la solución del modelo GR para capilares rectos, con el método PEF y su comparación con los reportados por Gauglitz y Radke (1990) con EF-G y Zhang *et al.* (2016) con MATLAB®, para $\varepsilon = 0.12$ y $\lambda_{max} = 2^{3/2} \pi$. Se muestran los resultados en: $\tau = 885.4$ — ; $\tau = 2766.2$ — ; $\tau = 12870.4$ — . 54

Figura 5.3 Evolución del radio de interfase κ al centro de la garganta del capilar ($x = 0$) con el modelo HE para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$, $Ca = 0.01$ y $K^* = 0.4$. Se comparan los resultados reportados por Hoyer *et al.* (2016) con el método FE (línea continua) y los obtenidos con el método PEF (línea punteada). 55

Figura 5.4 Evolución del radio de interfase κ al centro de la garganta del capilar ($x = 0$) con el modelo HE para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$, $Ca = 0.01$ y $K^* = 1.1$. Se comparan los resultados reportados por Hoyer *et al.* (2016) con el método FE (línea continua) y los obtenidos con el método PEF (línea punteada). 55

Figura 5.5 Perfiles de la evolución de la interfase elástica gas-líquido obtenidos mediante la solución del modelo HE con el método PEF y su comparación con los reportados por Hoyer *et al.* (2016) con el método FE, para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$ y $Ca = 0.01$. Se muestran los resultados para diferentes coeficientes de elasticidad: $K^* = 0$ — ; $K^* = 0.4$ — ; $K^* = 0.8$ — ; $K^* = 1.1$ — . 56

Figura 5.6	Comparación de los perfiles de la interfase momentos antes de la ruptura, obtenidos con el Método de Líneas (Beresnev y Deng, 2010) y el Método PEF para el modelo MDB. Los resultados corresponden a las simulaciones realizadas para $Ca = 10^{-3}$, $a = 0.6$, $\delta^* = 0.5R_g^*$, $\mu_1/\mu_2 = 10$ y las pendientes geométricas: $\alpha = 0.45$ —; $\alpha = 0.225$ — ; $\alpha = 0.0695$ — .	56
Figura 5.7	Comparación de los perfiles de la interfase obtenidos con el Método de Líneas (Beresnev y Deng, 2010) y el Método PEF para el modelo MDB. Los resultados corresponden a la simulaciones realizadas para los casos: $Ca = 10^{-3}$, $\alpha = 0.729$ y $\mu_1/\mu_2 = 10$ — ; $Ca = 3 \times 10^{-5}$, $\alpha = 0.0695$ y $\mu_1/\mu_2 = 0.1$ — . En ambos casos $a = 0.6$ y $\delta^* = 0.5R_g^*$.	57
Figura 5.8	Valores de Ca_{lim} para $a = 0.2$ y diferentes valores de radio de viscosidad k .	60
Figura 5.9	Familia de curvas de Ca_{lim} para diferentes radios de viscosidad.	60
Figura 5.10	Curvas del tiempo de ruptura τ_s para diferentes valores de k en un rango de Ca . Los resultados corresponden a una geometría de $L = 10$ y $a = 0.20$.	62
Figura 5.11	Familia de curvas de τ_s para $L = 10$ y diferentes valores de k a) $k = 0.75$ b) $k = 0.90$ c) $k = 1.0$ d) $k = 2.0$.	62
Figura 5.12	Gráfica de los valores del límite superior del número capilar en que se inhibe el rompimiento de gota (Ca_{lim}) dada una razón de radios, a , y longitud de poro, L ; para una razón de viscosidades de $k = 1.00$. Se muestran simultáneamente los resultados obtenidos en la serie de simulaciones realizadas por Deng <i>et al.</i> (2015) y los del ajuste de la Ec. (4.21).	65
Figura 5.13	Familia de curvas de Ca_{lim} obtenidas con diferentes modelos: 1) BD (Beresnev y Deng, 2010) — 2) Empírico de parámetros variables $Ca_{lim} = d\tilde{\alpha}^e L + f\tilde{\alpha}^g$ —●— 3) Empírico de parámetros fijos $Ca_{lim}^k = \beta\tilde{\alpha}^2 [\tilde{\alpha}^n L - C\tilde{\alpha}^{n+D}]$ —▼— .	67

Figura A1.1	Preparación de la fase continua a) Surfactante en polvo SLS b) Agitador magnético c) Vaso de vidrio con agua desionizada y surfactante siendo mezclados en el agitador magnético a 150 rpm.	81
Figura A1.2	Después de ser preparadas, las fases son almacenadas en frascos de vidrio a) Fase continua (agua con surfactante) b) Aceite Drakeol7 con colorante.	81
Figura A1.3	Microdispositivo <i>T-junction</i> de Dolomite®. En la parte superior de la figura se muestran los accesorios de conexión y dimensiones del microdispositivo; abajo se especifica la geometría de los canales y la configuración de la junta en forma de “T”.	83
Figura A1.4	Esquema del montaje experimental durante la formación de emulsiones con el microdispositivo <i>T-Junction</i> .	84
Figura A1.5	Toma microscópica durante la inyección de las fases en el dispositivo T-Junction para la formación de emulsiones aceite en agua (O/W). Por el Canal 1 fluye el aceite de forma continua y por el Canal 2, hasta antes de la unión, la solución de agua con surfactante. En el punto que coinciden ambos flujos se produce esfuerzos cortantes que provocan que el aceite pierda la continuidad, formándose gotas de aceite que fluyen junto con el agua hacia la salida del microdispositivo.	85
Figura A1.6	Gotas de una emulsión de aceite en agua (O/W) producidas con el microdispositivo <i>T-Junction</i> . Se utilizó el software AxioVision 4.6 para medir los tamaños de gota de la muestra. El tamaño promedio fue de 130 μm . La toma se hizo en un microscopio OMAX 40X-1000X con un objetivo de 10x.	85
Figura A1.7	Microdispositivo fabricado en el laboratorio (LMMP) a) Vista exterior: el canal colector está conectado a dos inyectores (en amarillo) que sirven como una de las entradas y salidas del flujo b) Toma microscópica de los tubos capilares durante su alineamiento para dispositivo de gota pequeña.	87
Figura A1.8	En la parte superior se muestra el esquema de canales el flujo de las fases y el proceso de formación de gotas. Abajo una toma microscópica durante este proceso.	87

Figura A1.9	Sistema experimental instalado para la formación de emulsiones.	88
Figura A1.10	Esquema del micromodelo de vidrio comercializado por <i>Dolomite Microfluidics</i> . Las medidas son en milímetros.	90
Figura A1.11	Configuración geométrica de la retícula base del micromodelo.	90
Figura A1.12	Sistema experimental instalado para la inyección de emulsiones, conformado por la bomba de jeringa, el microdispositivo montado en el microscopio con cámara, el monitoreo por computadora, la conexión de mangueras al microdispositivo y frascos para la recolección de emulsiones.	91
Figura A1.13	Gotas de aceite (en blanco) entrando al micromodelo saturado con agua (en verde). La toma microscópica se hizo con un objetivo de 2x.	91
Figura A1.14	Toma microscópica (con objetivo de 2.5x) de una zona del micromodelo a) Saturado con agua b) Al final de la inyección de gotas de emulsión.	92
Figura A1.15	Aspecto de la misma zona mostrada en la Figura A1.14b después de la inyección con agua con surfactante (recuperación secundaria). A simple inspección visual se aprecia una disminución considerable del número de gotas.	93
Figura A1.16	Toma microscópica (con objetivo de 2.5x) de las gotas que consiguieron atravesar el micromodelo. En la imagen se aprecia que se ha perdido la monodispersión de las gotas.	93
Figura A1.17	Gotas detectadas mediante los algoritmos de <i>Image-J</i> .	95
Figura A1.18	Distribución de áreas de gota al entrar al chip (en azul) y después de la recuperación con agua + surfactante (en marrón). El área original de las gotas de 125 μm dentro del chip es aproximadamente 1100 píxel.	96
Figura A1.19	Distribución de áreas de gota al entrar al chip (en azul) y después de la recuperación con agua + surfactante (en marrón). El área de las gotas de 160 μm dentro del chip es aproximadamente 1600 píxel.	97

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla		Página
Tabla 5.1	Coeficientes de ajuste y valores de la función error para los modelos de Ca_{lim}^a .	65

LISTA DE ABREVIATURAS

CFD	Dinámica de Fluidos Computacional
DTG	Razón entre el diámetro del capilar y el diámetro de gota
DTG	Distribución de los Tamaños de Gota
EDO	Ecuaciones Diferenciales Ordinarias
EDP	Ecuaciones Diferenciales Parciales
EF-G	Método de Elemento Finito – Galerkin
EOR	Recuperación mejorada de petróleo
FE	Euler Explícito
FFT	Transformada Rápida de Fourier
IFFT	Transformada Rápida de Fourier Inversa
BD	Beresnev y Deng
GR	Gauglitz y Radke
HE	Hoyer <i>et al.</i> Elástico
ML	Método de Líneas
PEF	Diferenciación Pseudo-Espectral con series de Fourier

RELACIÓN DE VARIABLES

a	Razón de radios
A	Área
(b, m)	Parámetros de ajuste de la regresión lineal de $Ca_{lim}^{\tilde{\alpha}}$
(A, B, C, D)	Parámetros de ajuste fijos para el modelo Ca_{lim}^k
c_1, c_2	Constantes de integración
Ca	Número Capilar local
Ca_{lim}	Límite superior del Número Capilar local
$Ca_{lim}^{\tilde{\alpha}}$	Valores de Ca_{lim} agrupados por $\tilde{\alpha}$
Ca_{lim}^k	Valores de Ca_{lim} agrupados por k
C_i	Coefficientes de Diferencias Finitas
C_m	Coefficientes de la serie de Fourier
d	Orden de la derivada
E	Función objetivo de parámetros fijos
E1	Función objetivo de parámetros variables
(d, e, f, g)	Parámetros de ajuste variables para el modelo Ca_{lim}^k
F()	Función sobre la que se realiza una aproximación
h	Distancia entre nodos
i	Unidad imaginaria ($\sqrt{-1}$)
j	Índice de nodo
k	Radio de viscosidades
K	Elasticidad interfacial dilatacional
ℓ	Longitud del capilar
L	Longitud del capilar adimensional
m,n	Contadores
N	Número total de nodos
p	Orden de truncamiento
P	Presión de flujo
Pe	Periodo de la función
P_c	Presión capilar

q	Velocidad de Darcy
Q	Flujo volumétrico total
r	Coordenada radial
R_g	Radio de la constricción del capilar
R_T	Radio del capilar en la cresta
t	Variable temporal
T	Esfuerzo superficial neto
u	Velocidad axial
x	Coordenada axial
α	Pendiente de pared de poro
$\tilde{\alpha}$	Gradiente geométrico de poro
δ	Espesor de la capa mojante
ε	Deformaciones superficiales de la interfase
γ	Tensión interfacial
κ	Radio de interfase
K	Curvatura promedio de la interfase
λ	Coordenada de la pared de poro
μ	Viscosidad dinámica
θ	Ángulo de contacto entre fases
σ	Tensión superficial
τ	Tiempo adimensional
Subíndices	
S, O, W	Sólido, aceite, agua, respectivamente
xx	Dirección axial
$\theta\theta$	Dirección azimutal
1	Fase no mojante
2	Fase mojante
+	Se refiere tanto a la fase mojante como a la no mojante
Superíndices	
*	Variable adimensional
\wedge	Variable en el espacio de Fourier

Aplastamiento de las gotas

Ahora aparece una gotita [...], va creciendo y se tambalea, ya va a caer y no se cae, todavía no se cae. Está prendida con todas las uñas, no quiere caerse y se la ve que se agarra con los dientes, mientras le crece la barriga; ya es una gotaza que cuelga majestuosa, y de pronto zup, ahí va, plaf, deshecha, nada, una viscosidad en el mármol.

*Pero las hay que se suicidan y se entregan enseguida, brotan en el marco y ahí mismo se tiran; me parece ver la vibración del salto, sus piernitas desprendiéndose y el grito que las emborracha en esa nada del caer y aniquilarse. Tristes gotas, redondas inocentes gotas. Adiós gotas.
Adiós.*

Julio Cortázar

I. INTRODUCCIÓN

El conocimiento adecuado del flujo multifásico en el medio poroso es de crucial importancia en procesos industriales como el manejo y remediación de aguas subterráneas, el almacenamiento y transporte de CO₂, la irrigación en agricultura y en la recuperación de petróleo. En el caso particular de un yacimiento petrolero, donde se presenta de manera simultánea el movimiento de agua, gas y aceite en un medio poroso complejo, resulta esencial la comprensión fundamental de los fenómenos que ocurren a escala de poro para explicar el comportamiento del flujo multifásico macroscópico.

Son variados los escenarios de flujo multifásico en la industria petrolera. Tal puede ser el caso de los proceso de recuperación secundaria, en los que se introduce agua por pozos inyectores para desplazar y recuperar en pozos productores los fluidos atrapados en el yacimiento. Condiciones similares se presentan en los métodos de recuperación mejorada, como el llamado *smart waterflooding*, en el que se modifica el diseño químico del agua inyectada para incrementar la recuperación de aceite. Sin embargo, estas condiciones de flujo en las que existe una interacción entre las diferentes fases, resultan favorables para la formación de algunos tipos de dispersiones dentro del medio poroso, de las que si no se tiene un control adecuado, pueden afectar de manera negativa la producción. Una dispersión es un sistema de dos fases, una fase se encuentra dispersa en una segunda fase (continua). Si la fase continua es un líquido, de acuerdo con la naturaleza de la fase dispersa, las dispersiones pueden ser: espumas (gaseosa) o emulsiones (líquida).

Dependiendo de las circunstancias, la formación de dispersiones dentro del medio poroso puede ayudar u obstaculizar la recuperación de petróleo. Por ejemplo, las gotas de una emulsión pueden bloquear algunos *clusters* de poros y así desviar el flujo hacia zonas no “barridas” permitiendo la movilización de aceite residual (Cobos et al., 2009; Romero et al., 2011; Guillén et al., 2012a; Guillén et al., 2012b).

Por otro lado, la formación de emulsiones sin control en la producción petrolera conlleva diversos problemas operacionales e incrementa los costos de producción: las emulsiones producidas tienen que ser tratadas para remover el agua y sales inorgánicas asociadas para cumplir con las especificaciones de transporte de aceite crudo y reducir la corrosión en instalaciones aguas abajo (Peña *et al.*, 2009).

1.1 Descripción del problema

Durante el flujo bifásico en un canal capilar, pueden tener lugar dos tipos de desplazamientos: drenaje, en el que la fase mojante es desplazada por la fase no mojante, e imbibición, que la fase mojante es adsorbida en el medio poroso y desplaza la fase residente no mojante. Por otro lado, es común en estos capilares la presencia de constricciones a lo largo de su estructura llamadas gargantas de poro. Bajo estas condiciones, cuando el fluido mojante es desplazado por otro fluido no mojante (drenaje), la fase desplazada deja una película delgada en la pared de la constricción, la cual puede aumentar su espesor y romper la continuidad de la otra fase. Este fenómeno es conocido como rompimiento de gota o *snap-off*, y es uno de los principales mecanismos de formación de emulsiones y espumas dentro del medio poroso.

El fenómeno de rompimiento de gota ha sido estudiado ampliamente mediante experimentos físicos (Arriola *et al.*, 1983; Aul y Olbricht, 1991; Beresnev *et al.*, 2011a; Gauglitz *et al.*, 1988; Han y Funatsu, 1978; Olbricht y Leal, 1983; Roof, 1970) y modelos teóricos (Beresnev y Deng, 2010; Gauglitz y Radke, 1988, 1990; Hammond, 1983; Hoyer *et al.*, 2016; Kouris y Tsamopoulos, 2000; Tsai y Miksis, 1994). Sin embargo, aún existe controversia en la determinación de las condiciones de flujo en las que éste ocurre o se inhibe (Kovscek y Radke, 2003; Kovscek *et al.*, 2007; Rossen, 2000, 2008).

De acuerdo con Deng *et al.* (2014), los estudios teóricos acerca del rompimiento de gota tienen típicamente dos objetivos: 1) el desarrollo de modelos

que describan la evolución de la interfase entre las fases mojante y no mojante hasta que ocurre el rompimiento de gota, si este ocurre, y 2) la definición de criterios de ruptura para establecer *a priori* la ocurrencia o inhibición del rompimiento de gota.

Los modelos teóricos de rompimiento de gota reportados en la literatura para los diferentes tipos de interfases (líquido-líquido, gas-líquido, etc.), han sido resueltos con diferentes técnicas numéricas y en algunos casos con *software* especializado de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés). Sin embargo, los métodos con el que se resuelven unos no siempre aplican para la resolución de otros, o no están disponibles al ser parte de *softwares* comerciales. Lo anterior puede ser una limitante al tratar, por ejemplo, de evaluar el efecto de diferentes fluidos en un mismo sistema de flujo.

En cuanto a los criterios de ruptura, que permiten establecer *a priori* la ocurrencia del rompimiento de gota, es importante destacar que los enfoques actuales han sido formulados para condiciones cuasi-estáticas (Beresnev *et al.*, 2009; Roof, 1970), en las que los mecanismos que gobiernan el flujo son controlados por la geometría del capilar. En contraste, algunos estudios teóricos sugieren que el rompimiento de gota no ocurre por arriba de un valor umbral del número capilar, aún cuando se cumplen los criterios estáticos de ruptura (Deng *et al.*, 2015). Incluso, se ha observado en experimentos de microfluídica que la razón de viscosidades influye también en la dinámica del rompimiento (Peña *et al.*, 2009)

En esta tesis, se analiza teórica y experimentalmente el rompimiento de gota durante el flujo a través de capilares con constricción en sistemas que involucran líquidos y gases. El enfoque teórico aquí planteado se divide en dos temas principales: uno es la resolución numérica de modelos matemáticos que describen la evolución de la interfase entre los fluidos hasta que ocurre el rompimiento de gota; el otro consiste en la determinación *a priori*, mediante los llamados criterios de ruptura, de las condiciones dinámicas y reológicas de flujo en las que ocurre o se inhibe el rompimiento de gota.

Para el primer planteamiento se propone un marco de trabajo basado en métodos pseudo-espectrales de series de Fourier con el que son resueltos los modelos de rompimiento de gota para diferentes tipos de interfases. En cuanto a los criterios de ruptura, se establecieron formulaciones empíricas para condiciones dinámicas de flujo basadas en el análisis del número capilar límite, en el cual se inhibe el rompimiento de gota considerando el efecto que tiene en éste la tasa de viscosidades.

Por otra parte, se expone la metodología con la que se realizaron una serie de experimentos de microfluídica, consistentes en la inyección de emulsiones monodispersas (aceite / agua) a través de un microdispositivo transparente formado de una red de microcanales cilíndricos con constricción, el cual es monitoreado con un microscopio óptico con cámara digital de alta velocidad.

1.2 Justificación

El petróleo sigue siendo la principal fuente de energía a nivel mundial, ocupa el primer lugar de la cadena energética, con una participación del 31% del consumo total de energía primaria (BP, 2015). Según las proyecciones para el año 2040 de la Administración de Información Energética de los Estados Unidos (EIA, 2015), el aumento pronunciado y continuo del consumo de energía aunado a una caída de la producción mundial de petróleo tenderán a inducir un aumento en los precios. Ya que la demanda global de energía va aumentando con el paso de los años, se hace necesario el desarrollo de técnicas que busquen mayor producción a bajo costo.

Para producir, los yacimientos necesitan de determinada energía, conocida como energía primaria, que depende de diversas condiciones de éste: volumen, porosidad, permeabilidad, presión y temperatura; y propiedades de los fluidos: viscosidad, densidad y contenido de impurezas. Con el paso del tiempo los yacimientos pierden una parte de esa energía y la producción empieza a disminuir, lo que implica una reducción en la producción, aunque todavía una fracción

significante de petróleo permanece atrapada por fuerzas capilares dentro del yacimiento. Esta fracción es llamada petróleo residual.

Es bajo las condiciones antes descritas que se emplean mecanismos suplementarios de producción de petróleo conocidos como métodos secundarios de recuperación. Los métodos de recuperación secundarios consisten en inyectar dentro del yacimiento un fluido menos costoso que el petróleo para mantener un gradiente de presión. Estos fluidos se inyectan por los pozos inyectoros, y desplazan o arrastran una parte del petróleo hacia los pozos productores. El método tradicional de recuperación secundaria es la inyección de agua, la cual permite elevar la recuperación del aceite hasta un promedio de 25-30%, con variaciones desde 15 hasta 40% según los casos (Salager, 2005). Durante esta etapa de producción entran en contacto el agua y el aceite, lo que puede provocar la formación espontánea de emulsiones.

Como ya se mencionó, la formación de emulsiones sin control conlleva incrementa los costos de producción, ya que, por ejemplo, el tiempo de residencia requerido en equipos de separación está en función de la morfología de la emulsión. La morfología de las emulsiones producidas afecta las características del flujo en pozos de producción, canalizaciones verticales, equipamientos y tuberías. Esta morfología cambia a medida que las condiciones de funcionamiento de un yacimiento de petróleo evolucionan en el tiempo, cambiando a su vez la relación gasto-caída de presión.

Por lo anterior, el entendimiento fundamental del proceso de emulsificación, generado a partir del rompimiento de gota durante el flujo bifásico a través de las gargantas del capilar, es crítico en los procesos de producción de petróleo, en el diseño de equipos y en la optimización de la producción.

1.3 Hipótesis y objetivos

1.3.1 Hipótesis

El proceso de rompimiento de gota durante el flujo de emulsiones en capilares con constricción, depende de la interacción de fuerzas competitivas que actúan tanto en los límites como al interior de las fases, y están determinadas por la geometría del capilar, la reología de los fluidos y los factores dinámicos del flujo, en forma conjunta.

1.3.2 Objetivo General

Desarrollar una metodología que permita resolver numéricamente los modelos de rompimiento de gota para diferentes tipos de interfases, para así determinar el conjunto de parámetros físicos en los que se inhibe la ruptura; además de analizar el efecto de estos últimos en la dinámica del proceso, principalmente el tiempo de ruptura.

1.3.3 Objetivos particulares

- 1) Realizar una revisión de los modelos de rompimiento de gota reportados para diferentes tipos de interfases y a partir de ésta establecer una formulación matemática común entre ellos.
- 2) Desarrollar un esquema de trabajo unificador en el que puedan ser resueltos numéricamente los modelos de rompimiento de gota, independientemente de la naturaleza de las fases con las que se trate.
- 3) Comparar los resultados de la modelación con el esquema numérico propuesto y los reportados en la literatura con otros métodos.
- 4) Extender el análisis numérico actual sobre el número capilar límite para evaluar, además de la geometría, el efecto de la razón de viscosidades en la dinámica del rompimiento de gota.

- 5) Establecer criterios de ruptura para condiciones dinámicas de flujo a partir del análisis de las condiciones límite en que se inhibe el rompimiento de gota, antes mencionado.

1.4 Contenido de la tesis

El presente trabajo de tesis se divide en seis Capítulos. Primeramente, en el Capítulo I, se presenta la introducción al problema de la formación de emulsiones por rompimiento de gota en el contexto de la recuperación de petróleo y su importancia para la optimización de la producción. Más adelante, en este mismo Capítulo, fueron expuestas las áreas de oportunidad detectadas en el contexto actual del tema y en este sentido se plantean la hipótesis y los objetivos de la tesis. El Capítulo II consiste en una revisión bibliográfica de los principales tópicos de esta investigación. En el Capítulo III, Formulación Matemática, se desarrollan los modelos matemáticos de rompimiento de gota, a partir de las ecuaciones gobernantes del flujo bifásico a escala de poro, para diferentes tipos de interfases. El siguiente Capítulo (IV), presenta los métodos numéricos que se utilizan para la resolución numérica de los modelos de rompimiento de gota y la metodología para establecer un modelo empírico para estimar el número capilar límite en que se inhibe el rompimiento de gota. En el Capítulo V, Resultados y Discusión, se muestra la comparación de los resultados obtenidos al resolver los modelos de rompimiento de gota con la metodología aquí propuesta y los reportados en la literatura. Además, en otro apartado, se presenta la validación de un criterio de ruptura para condiciones dinámicas de flujo. El Capítulo VI contiene las conclusiones que se obtuvieron de este trabajo y algunas recomendaciones generales. Posterior a esto, se enlista la literatura citada. Finalmente, en el Anexo A.1 se presenta la metodología con la que se realizaron una serie de experimentos de microfluídica, consistentes en la inyección de emulsiones monodispersas (aceite/agua) a través de un micromodelo del medio poroso.

II. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

Esta sección se enfoca en analizar los trabajos reportados sobre la formación y flujo de emulsiones durante la recuperación secundaria de petróleo. Los trabajos aquí expuestos son principalmente del tipo experimental y de modelación matemática. El Capítulo se divide en tres subcapítulos. En el epígrafe 2.1 se describen conceptos básicos del flujo bifásico a escala de poro, a los cuales se hará constante referencia durante la tesis, y su relación en la recuperación de petróleo. En 2.2 se describen los principales aspectos del flujo de emulsiones en el medio poroso, además se expone una amplia revisión de las publicaciones que tratan sobre el mecanismo de formación de emulsiones por rompimiento de gota, así como de aquellos trabajos en los que se estudia la dinámica del flujo de emulsiones en el medio poroso y su utilización en procesos de recuperación de petróleo. Finalmente, en 2.3 se muestra un estudio de los principales grupos de investigación que a nivel mundial trabajan actualmente en temas similares al que aquí se trata.

2.1 Conceptos básicos del flujo bifásico a escala de poro

A escala macroscópica, el flujo de fluidos inmiscibles en un medio poroso se describe mediante la especificación de las relaciones entre cantidades globales tales como caudal, gradiente de presión y saturación de fluido. Sin embargo, estas propiedades macroscópicas del flujo son definidas fundamentalmente por procesos microscópicos a la escala de poro. En la escala de poro, este flujo se rige por la competencia entre fuerzas capilares, viscosas y gravitacionales (Georgiadis *et al.*, 2013). En los siguientes apartados se expone la física de la interacción de estas fuerzas durante el flujo bifásico a escala de poro.

2.1.1 Fenómenos interfaciales

Cuando un medio poroso está ocupado por dos líquidos inmiscibles, la forma en cómo los líquidos están distribuidos dentro de los poros varía conforme a las propiedades del sólido, los líquidos y la manera por la que llegaron a estar ahí.

Una interfase curva entre dos fluidos inmiscibles indica una diferencia de presiones, llamada presión capilar, P_c . La ecuación de Laplace relaciona la diferencia de presión entre los dos lados de una interfase con la curvatura de la forma:

$$P_c = \sigma K \quad (2.1)$$

donde σ es la tensión superficial y K es la curvatura promedio de la interfase.

Para explicar el concepto de tensión superficial considérese el caso de una gota de aceite en aire. En general en el interior de una gota las moléculas se atraen unas con otras; sin embargo, en la frontera de la gota, las fuerzas de atracción de las moléculas dentro no están equilibradas por las fuerzas de atracción de las moléculas fuera de ésta. El resultado es una modificación del arreglo estructural de las moléculas en la superficie de la gota. Este cambio en la superficie viene acompañado por un cambio de energía designado por γdA ; donde dA es el cambio de la superficie y γ la tensión interfacial. En el caso de dos fluidos esta fuerza se le nombra tensión superficial, σ (Gary, 2008).

Si la misma gota se coloca sobre la superficie de un sólido, estando el sistema sumergido en agua, la gota se extiende hasta que el contacto trifásico presenta un equilibrio (Salager, 2005). Al ángulo de intersección entre la interfase entre estos dos fluidos con la superficie sólida se le llama ángulo de contacto, θ . Bajo estas condiciones, valores de θ pequeños indican preferencia del sólido a ser mojado por agua mientras que ángulos grandes reflejan la preferencia por el aceite. En la curva del borde de la gota de aceite donde las fases sólidas y líquidas se juntan, la llamada línea común, actúan las fuerzas de tensión superficial, γ . El equilibrio se expresa como un balance vectorial entre estas fuerzas cuyas direcciones son las tangentes a las interfaces involucradas, teniéndose: $\gamma_{SO} = \gamma_{SW} + \gamma_{OW} \cos \theta$; donde los subíndices S, O y W, indican sólido, aceite y agua, respectivamente. (Figura 2.1). Las fuerzas de mojabilidad influyen el

comportamiento de yacimientos de hidrocarburos de varias maneras, incluyendo la saturación, el flujo multifásico y en gran medida la cantidad de aceite producido. Estudios recientes (Alyafei y Blunt, 2016; Gharbi y Blunt, 2012; Kallel *et al.*, 2015; Singh *et al.*, 2016) se han enfocado en evaluar la influencia de la mojabilidad en la tasa de recuperación y la configuración del aceite residual.

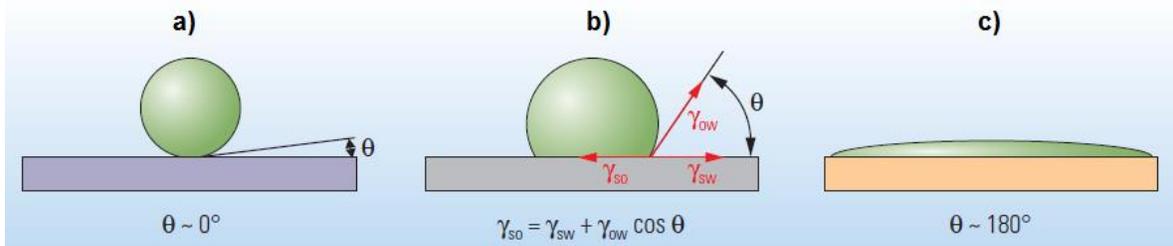


Figura 2.1 Efectos de la mojabilidad de la fase sólida en el ángulo de contacto de una gota de aceite (en verde) sumergida en agua (azul) **a)** En una superficie mojable por agua, el ángulo de contacto, θ , es aproximadamente cero **b)** Para una mojabilidad intermedia el ángulo de contacto está determinado por el balance de fuerzas del contacto trifásico **c)** La gota tiende a extenderse en una superficie mojable por aceite formando un ángulo, θ , cercano a 180° [modificada de Abdallah *et al.* (2007)] .

2.1.2 Número capilar

Cuando ocurre el flujo bifásico en un capilar las fuerzas viscosas y superficiales actúan de una manera competitiva. El número capilar es un número adimensional que relaciona estas dos fuerzas de la forma:

$$Ca = \frac{\mu_2 q}{\sigma} \quad (2.2)$$

donde Ca es el número capilar, q es la velocidad Darcy, μ_2 la viscosidad dinámica de la fase no mojante y σ la tensión superficial.

Para valores de $Ca > 1$ las fuerzas viscosas dominan sobre las fuerzas superficiales mientras que para $Ca < 1$ las fuerzas viscosas son despreciables en comparación con las fuerzas superficiales.

El porcentaje de recuperación de aceite residual está estrechamente relacionado con el orden de magnitud de Ca (Armstrong *et al.*, 2014; Jamaloei *et al.*, 2010), obteniéndose mayores tasas recuperación para valores cercanos a la unidad. Por lo tanto, los métodos de recuperación tienen como propósito aumentar el número capilar, lo que puede lograrse modificando en la fase acuosa: la velocidad, que implicaría un aumento de la presión de inyección; la viscosidad, como cuando se inyectan polímeros; la tensión interfacial con el aceite, al adicionar surfactantes.

2.2 Emulsiones en el medio poroso

Una dispersión es un sistema de dos fases en la cual una fase se encuentra dispersa en una segunda fase, llamada continua. Existen diferentes tipos de dispersiones que pueden ser producidas teniendo un líquido como fase continua, de acuerdo con la naturaleza de la fase dispersa se tienen: espumas (gaseosa), emulsiones (líquida) y suspensiones (sólida). Este trabajo se enfoca en las emulsiones.

Las emulsiones pueden ser del tipo agua en aceite (W/O), aceite en agua (O/W) y múltiples (O/W/O y W/O/W); en donde el primer componente se refiere a la fase dispersa la cual se presenta en forma de gotas. Cuando una emulsión no presenta cambios significantes durante un periodo de tiempo suficientemente largo para el propósito de la aplicación práctica, se dice que ésta es estable. Las emulsiones son generalmente estabilizadas por un surfactante. Un surfactante es una sustancia cuyas moléculas actúan disminuyendo la tensión interfacial entre dos fases líquidas y creando fuerzas repulsivas entre las gotas, inhibiendo así la coalescencia entre ellas. Un parámetro de gran importancia en una emulsión es su morfología, la cual se define como la distribución de la densidad de volumen de los diámetros de gota de la fase dispersa.

La formación y flujo de emulsiones en yacimientos es un fenómeno importante en la producción de petróleo. Al generarse en forma de emulsiones la mayor parte de la producción petrolera, resulta esencial conocer los mecanismos

que las generan, además de sus propiedades y las leyes físicas que controlan su flujo a través del medio poroso. En los apartados que siguen se da cuenta de los trabajos que han analizado la formación de emulsiones en el medio poroso por el mecanismo llamado rompimiento de gota, de la utilización de estas en los procesos de recuperación mejorada y la dinámica del flujo de emulsiones a través del medio poroso.

2.2.1 Formación de emulsiones por rompimiento de gota

La estructura porosa de un yacimiento presenta formas complejas, entre éstas se encuentra la presencia de constricciones a lo largo de su estructura llamadas gargantas de poro (ver Figura 2.2). Esta geometría básica del medio poroso, consistente en un canal con una o más constricciones, ha sido utilizada para estudiar teórica y experimentalmente el mecanismo de rompimiento de gota durante el flujo bifásico inmiscible a escala de poro.

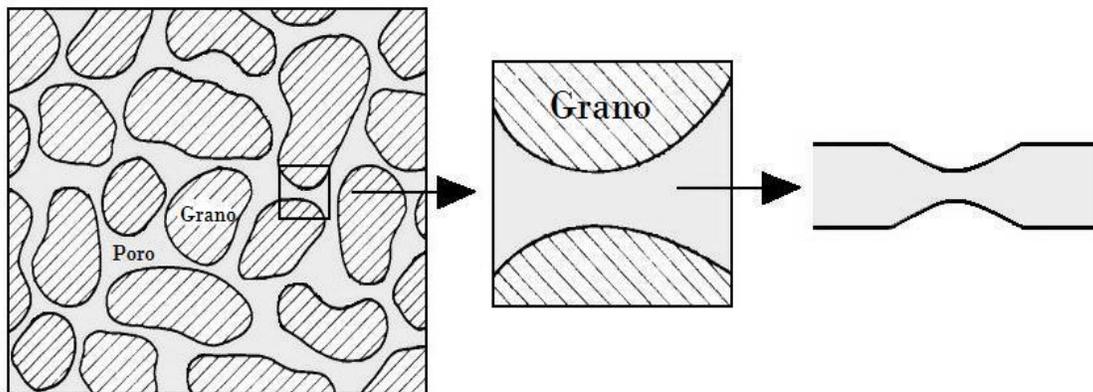


Figura 2.2 Esquema de gargantas de poro en la estructura del medio poroso y modelo físico de tubos capilares (modificada de Peixoto, 2011).

El fenómeno de rompimiento de gota se esquematiza en la Figura 2.3. Durante el flujo bifásico inmiscible en el medio poroso una de las fases moja las paredes formando un filme y la otra configura una interfase en los límites de esta última. El rompimiento de gota ocurre cuando una gota de la fase no mojanete se

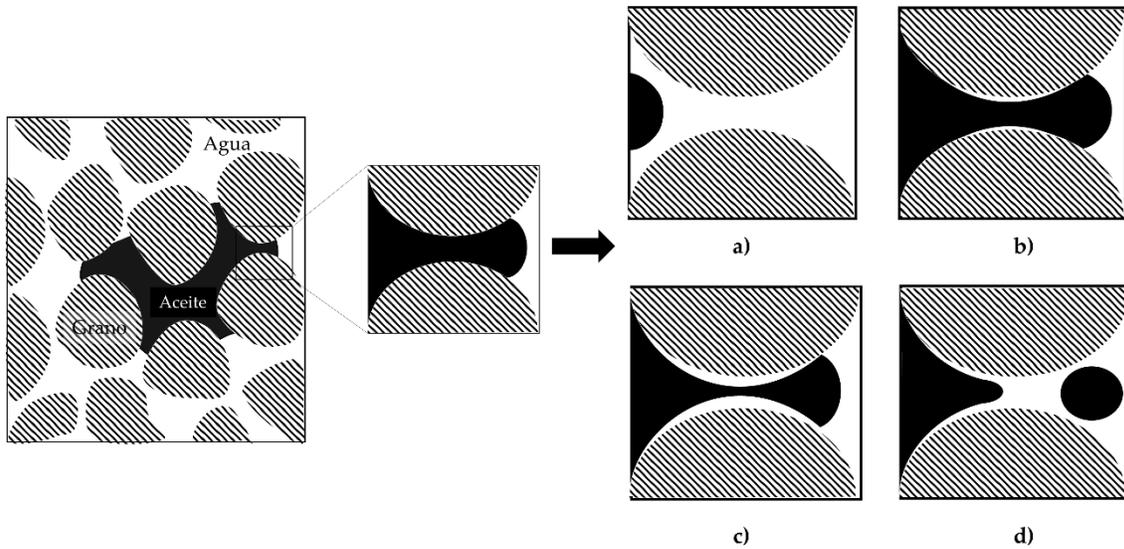


Figura 2.3 Mecanismo de rompimiento de gota.

mueve a través de la constricción y se forma un collar de la fase mojanete alrededor de la gota en la constricción y la gota se rompe ahí.

Los primeros trabajos experimentales en esta área se remontan a los realizados por Roof (1970), en los que analizó el rompimiento de gota en capilares circulares de vidrio con constricción bajo condiciones límite ($Ca = 0$), concluyendo que el tiempo de ruptura depende de la geometría. Posteriormente Han y Funatsu (1978) utilizaron, además de la geometría, las propiedades reológicas para explicar la ocurrencia del rompimiento de gota en capilares con geometría convergente. El mecanismo de rompimiento de gota también ha sido analizado para valores de $Ca > 0$. Arriola *et al.* (1983) estudiaron experimentalmente el movimiento de gotas líquidas viscosas en capilares de sección cuadrada con constricción. En sus experimentos observaron que, si el caudal es suficientemente grande las gotas se mueven a través de la constricción; cuando esto sucede, un collar de la fase mojanete se forma ligeramente aguas arriba de la constricción y crece hasta ocurrir el rompimiento de gota, las cuales son aproximadamente del diámetro de la constricción. Por su parte Olbricht y Leal (1983) reportan los resultados de experimentos de flujo laminar de gotas en capilares con geometría sinusoidal. Uno de sus principales contribuciones es el evaluar la influencia de diferentes geometrías

en el tamaño de las nuevas gotas generadas por ruptura. Gauglitz *et al.* (1988) experimentaron con gotas de gas y añadieron surfactante a la fase acuosa, estos autores no encontraron diferencias significantes al modificar el sistema con este tipo de sustancias químicas. En los inicios de la década de 1990 Aul y Olbricht (1991) y Zorin y Churaev (1992) continuaron evaluando el efecto de diferentes geometrías y de las propiedades reológicas del sistema bifásico. Una revisión exhaustiva de trabajos sobre el tema, reportados hasta fechas antes de su publicación, puede consultarse en Olbricht (1996).

Con base en los trabajos experimentales hasta ahora expuestos, se explicaba que la repetición del mecanismo de rompimiento de gota, formulado bajo el criterio de Roof (1970), en las diferentes gargantas del medio poroso era la causante de la generación de espumas y emulsiones en el medio poroso; tal como lo plantearon en ese tiempo Kovscek y Radke (1996). En un análisis de este criterio, Rossen (2000, 2003) demostró que el rompimiento de gota se detiene cuando en la garganta aguas abajo de donde ocurre el rompimiento de gota se tiene la presencia de gotas bloqueando el flujo. Uno de los argumentos vertidos por este autor es que los estudios experimentales en capilares con constricción no representan del todo bien las condiciones del medio poroso, además de afirmar que los modelos teóricos soportados en el criterio de Roof, como el reportado por Kovscek y Radke (2003), incorporan condiciones iniciales y de frontera que no son aplicables al flujo de espumas en medios porosos. Por su parte, Kovscek *et al.* (2007) realizaron un análisis visual de la dinámica del flujo simultáneo de agua y gas en un micromodelo bidimensional de silicón, en el que verifican la relevancia del mecanismo de rompimiento de gota de Roof como generador de espumas en el medio poroso en flujo permanente. Las condiciones iniciales del experimento consistieron en un medio poroso casi seco. En respuesta a este último análisis, Rossen (2008) observa en una comunicación que la relación entre la geometría de poros y el rompimiento de gota es inconsistente en los experimentos reportados por estos últimos autores.

Como puede deducirse de esta revisión, el criterio geométrico de Roof no presenta una descripción completa del fenómeno de rompimiento de gota, incluso en trabajos recientes se han propuesto algunas modificaciones al mismo (Deng *et al.*, 2014). Lo anterior evidencia la necesidad de explorar nuevos enfoques para explicar el mecanismo de rompimiento de gota.

El estudio del rompimiento de gota de gotas ha sido abordado también con modelos matemáticos. Un avance importante en este rubro fue el enfoque película delgada (del inglés, *thin film*) propuesto por Hammond (1983) para un sistema bifásico líquido-gas en capilares rectos, la cual es capaz de modelar la evolución de la interfase del sistema, más sin llegar a la ruptura. Posteriormente Gauglitz y Radke (1988, 1990) mejoran el enfoque película delgada y reportan un modelo descrito por la ecuación diferencial que nombran pendiente pequeña (*small slope*), la cual permite predecir la ruptura en capilares rectos y con constricción en este tipo de sistemas. Por su parte Tsai y Miksis (1994, 1997) desarrollan un modelo matemático de flujo de frontera móvil en todo el dominio de una gota axisimétrica para estudiar el mecanismo de rompimiento de gota en capilares y el efecto de los parámetros físicos de la dinámica de la gota, incluso bajo la presencia de surfactante en el sistema.

Los modelos matemáticos arriba descritos consideran en su formulación la fase no mojante de viscosidad despreciable, que corresponde al caso de una burbuja de gas, lo cual simplifica el problema numérico. Kouris y Tsamopoulos (2000) desarrollaron un modelo de flujo núcleo-anular (*core-anular*) de fluidos viscosos en capilares sinusoidales que resuelven mediante métodos pseudo-espectrales; aunque este modelo calcula la evolución de la interfase durante el flujo bifásico no considera el rompimiento y formación de gotas. Más tarde, estos mismos autores (Kouris y Tsamopoulos, 2002) resuelven las limitantes mencionadas incorporando la dinámica no lineal del flujo en su modelo. Beresnev y Deng (2010) desarrollan un análisis numérico de las condiciones de rompimiento de gota de fluidos viscosos en capilares mediante una ecuación de evolución que toma la

aproximación pendiente pequeña y considera la presencia de flujo base. Los resultados de este análisis fueron validados posteriormente mediante experimentación (Beresnev *et al.*, 2011a). Recientemente Hoyer *et al.* (2016) incluyen esfuerzos interfaciales elásticos para extender las formulaciones hasta ahora reportadas con el fin de simular el comportamiento de gotas con interfases complejas que pueden presentar comportamientos viscosos y elásticos. Sus resultados muestran que la elasticidad interfacial tiene un efecto estabilizador alargando el tiempo en que ocurre el rompimiento de gota.

2.2.2 Flujo de emulsiones como mecanismo de recuperación mejorada

El estudio del flujo de emulsiones comenzó a cobrar relevancia en los laboratorios de investigación petrolera en la primera mitad de la década de 1970 debido al desarrollo de nuevos métodos de recuperación mejorada de petróleo (EOR, por sus siglas en inglés), consistentes en la inyección de emulsiones para reducir la producción de agua e incrementar la eficiencia en la producción (Ho y Leal, 1975; McAuliffe, 1973a, 1973b). Alvarado y Marsden Jr (1979) propusieron un modelo reológico, basado en una modificación de la ley de Darcy, para describir el comportamiento del flujo de emulsiones en el medio poroso. Soo y cols. (Soo y Radke, 1986; Soo *et al.*, 1986) desarrollaron y validaron un modelo de filtración en un medio poroso para describir el flujo de emulsiones diluidas.

Cobos *et al.* (2009) hacen notar que en los trabajos experimentales en capilares hasta ese tiempo reportadas se consideraron diámetros en el orden de 1-5 mm, que son mucho más grandes que los tamaños que se presentan en el medio poroso, además que el rango de los números capilares explorados, $10^{-2} < Ca < 1$, está fuera de los rangos típicos del flujo en poros. Estos autores reportan un estudio experimental de inyección de emulsiones, utilizando capilares con diámetro de constricción de 50 μm , números capilares más bajos y gotas más viscosas que la fase continua; de éste concluyen que el flujo de la emulsión es dominado por el mecanismo de bloqueo de gotas de diámetros más grandes que la constricción que

provoca oscilaciones abruptas en la presión asociadas al paso de estas gotas a través de la constricción. Bajo esas condiciones, el comportamiento del flujo está en función del número capilar, el cual si está por encima de un valor crítico no altera el gradiente de presión del flujo. Este mecanismo lo caracterizan mediante la comparación con el flujo en el capilar de la fase continua aislada, observando así la influencia del diámetro la fase dispersa.

Por su parte Romero *et al.* (2011) reportan un modelo de redes de poros que obtiene la respuesta a la escala de Darcy haciendo un *upscaling* de las descripciones del flujo a escala de poro. El modelo se basa en la relación caudal-caída de presión obtenida en experimentos de flujo de emulsiones en capilares, similares a los reportados por Cobos *et al.* (2009), y es validado con los resultados experimentales de flujo en núcleos. Guillén *et al.* (2012b) proponen un control selectivo de movilidad impulsado por fuerzas capilares basado en la idea de que la movilidad de las gotas es controlada por el número capilar local y concluyen, con base en experimentos de inyección de emulsiones en núcleos, que se tiene mayor eficiencia en la recuperación para números capilares bajos. En un trabajo posterior Guillén *et al.* (2012a) inyectan emulsiones en un dispositivo transparente *sandpack*, para clarificar el mecanismo mediante el cual ocurre esta recuperación; demostrando que es el mecanismo bloqueo de poros por las gotas de la emulsión inyectada, y con ello el desvío del flujo hacia regiones que no habían sido “barridas”, el responsable de la movilidad del aceite residual.

En un estudio reciente, Moradi *et al.* (2014) no sólo toman en cuenta el número capilar, sino que incluyen la relación entre el tamaño del poro y de la gotas de la emulsión inyectada en muestras de roca para explicar el mecanismo de atrapamiento de gotas y su relación en la eficiencia de recuperación. Además monitorean las oscilaciones de presión para asociarla al movimiento de gotas a través de las constricciones.

La comprensión y diseño de recuperación mejorada de petróleo basada en la inyección de emulsiones se ha apoyado en un mejor entendimiento del flujo de emulsiones a través del medio poroso y los mecanismos de desplazamiento. El análisis del cambio de la morfología de una emulsión, distribución de los tamaños de gota, después de ser inyectada y atravesar un medio poroso puede ser un indicador de los mecanismos que ocurren durante el flujo. Soo y Radke (1984) estudian el flujo de emulsiones estables de aceite en agua a través de *sandpacks* de cuarzo. En estos experimentos comparan la concentración y distribución de gotas de la emulsión antes de entrar al medio y a la salida del mismo. Thomas y Ali (1989) realizaron experimentos y mediciones similares pero haciendo énfasis en la reología de la emulsión. Moradi *et al.* (2014) analizan el efecto de filtro que tiene el medio poroso sobre la emulsión inyectando en muestras de roca emulsiones de distribución de tamaños de gotas conocida y monitoreando la presión en todo momento. De esta forma logran correlacionar la respuesta de la caída de presión con el flujo de la emulsión. En estos experimentos también se compara la distribución de los tamaños de gota antes de ser inyectada y a la salida del medio.

Debe notarse que los estos experimentos arriba expuestos son realizados en muestras de roca, en donde no se tiene una visualización directa de los fenómenos que ocurren a escala de poro, por lo que se utilizan correlaciones con mediciones macroscópicas para explicarlos. De acuerdo con Erpelding *et al.* (2013), desde un punto de vista experimental, un modelo bidimensional del medio poroso que permita la visualización directa de las estructuras del flujo es una herramienta ideal para estudiar el flujo bifásico y su relación con cantidades globales en situaciones controladas a escala de laboratorio. Uno de los tópicos de esta tesis es el estudio experimental de los mecanismo de flujo de emulsiones en un micromodelo de canales transparentes, saturado solamente con agua, de geometría de poros conocida, que permite monitorear los cambios que sufre la morfología de una emulsión cuando fluye a través de este medio y a la salida del mismo.

2.3 Grupos de investigación

Uno de los grupos más sobresalientes en el estudio del flujo multifásico en el medio poroso enfocado en la recuperación de petróleo es *The Imperial College Consortium on pore scale modelling* liderado por el Prof. Martin Blunt y tiene su sede en el Reino Unido. Una de las principales líneas de investigación de este grupo es el uso de modelos a escala de poro basados en una descripción realista del espacio poroso y un análisis detallado de los mecanismos de desplazamiento para predecir las propiedades del flujo multifásico. Los trabajos de este grupo abarcan la modelación matemática del flujo multifásico, el procesamiento de imágenes para la construcción de modelos realistas del medio poroso y diversos experimentos en núcleos de roca.

El *Laboratory of Microhydrodynamics and Flow in Porous Media* (LMMP) de la *Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro*, en Brasil, que lidera el Prof. Márcio Carvalho, tiene entre una de sus áreas de investigación la formación de emulsiones dentro del medio poroso, teniendo como objetivo visualizar los mecanismos de ruptura, determinar las condiciones críticas para la formación de emulsiones y las características de la emulsión formada en cada situación.

En estrecha colaboración con este último grupo, se encuentra el *Enhanced Oil Recovery Institute* (EORI) a cargo del Prof. Vladimir Alvarado, con sede en la Universidad de Wyoming, EUA. En años recientes este grupo ha estado involucrado en iniciativas experimentales y de modelación para investigar el flujo de emulsiones a través de medios porosos. Han desarrollado modelos de flujo en poros y en redes de poros basados en la observación de los fenómenos que ocurren el flujo dentro de modelos de vidrio poro-garganta. Su investigación se centra en la comprensión de los mecanismos de flujo para el desarrollo de estrategias de recuperación mejorada de petróleo utilizando emulsiones. Su objetivo principal es crear modelos robustos de simulación del flujo de dispersiones en yacimientos.

Además de los grupos arriba mencionados, algunos otros han estado temporalmente implicados en investigaciones relacionadas con el flujo a escala de poro y la formación de emulsiones en el medio poroso. Tal es el caso del grupo liderado por el Prof. Clayton Radke, en la *University of California*, EUA. Este grupo desarrolló una amplia investigación, tanto experimental como numérica, principalmente en el tema del mecanismo de rompimiento de gota. Sus publicaciones sobre el tema iniciaron a mediados de la década de 1980 y se prolongaron hasta finales de la primera década del año 2000.

2.4 Resumen del Capítulo

En el presente Capítulo se expone el estado del arte del mecanismo de rompimiento de gota en el contexto del flujo bifásico a escala de poro en capilares. En este sentido, primero, se introducen los conceptos fundamentales para entender la física del fenómeno de estudio: la tensión superficial, la presión capilar, la mojabilidad y el número capilar. A continuación, se citan los principales trabajos reportados sobre la formación de emulsiones en el medio poroso por rompimiento de gota. Las investigaciones referidas tratan sobre trabajos teóricos y experimentales de flujo en capilares y redes de capilares. En cuanto a la cuestión teórica se exponen los enfoques más importantes y las características de los modelos matemáticos surgidos a partir de éstos. Mientras que en la parte experimental se tienen en su mayoría estudios enfocados en el flujo y formación de emulsiones por rompimiento de gota para evaluar su efecto en la recuperación de petróleo. Al final de este Capítulo, se enlistan los grupos de investigación que en la actualidad son la vanguardia en el estudio del flujo y formación de emulsiones en el medio poroso.

III. FORMULACIÓN MATEMÁTICA

En este capítulo se expone la formulación matemática de los modelos que se utilizaron para simular el proceso de rompimiento de gota en dispersiones durante el flujo a través de capilares con constricción. La formulación se basa en las ecuaciones que gobiernan el flujo bifásico inmiscible a escala de poro. Se hace la distinción entre dos tipos de formulaciones en función de la naturaleza de las fases: las que se enfocan en sistemas en donde la viscosidad una de las fases es despreciable, tal es el caso de las espumas (dispersiones líquido/gas); y aquellas que consideran un sistema viscoso líquido-líquido, que sería el caso de emulsiones (dispersiones líquido/líquido). A la primera clasificación corresponden el modelo de Gauglitz y Radke (1990) y el propuesto por Hoyer *et al.* (2016); siendo este último una extensión del primero para interfases elásticas. Dentro de los segundos está el modelo de Beresnev y Deng (2010).

Estos modelos, aunque con sus particularidades que los distinguen, tienen su fundamento en el enfoque pendiente pequeña (Gauglitz y Radke, 1990), el cual consiste en una mejora de la aproximación de la ecuación de Young-Laplace; es decir, en el balance de las fuerzas de presión que tienen su expresión en la curvatura de la interfase. El enfoque pendiente pequeña asume números capilares (Ca) y de Reynolds (Re) pequeños, lo que permite aproximar el flujo en el capilar como un flujo de Poiseuille.

3.1 Geometría del problema

La estructura porosa del medio poroso presenta formas geométricas complejas, entre éstas se encuentra la presencia de constricciones en los canales capilares llamadas gargantas de poro. Esta geometría básica del medio poroso, consistente en un capilar con una o más constricciones, ha sido utilizada para estudiar el mecanismo de rompimiento de gota durante el flujo bifásico inmiscible a escala de poro. Durante este tipo de flujo los poros tienen preferencia de ser

mojados por una de las fases, ya sea agua o aceite; por lo que una capa de la fase mojannte estará presente entre la pared del poro y la fase no mojannte. Esta configuración se esquematiza en la Figura 3.1.

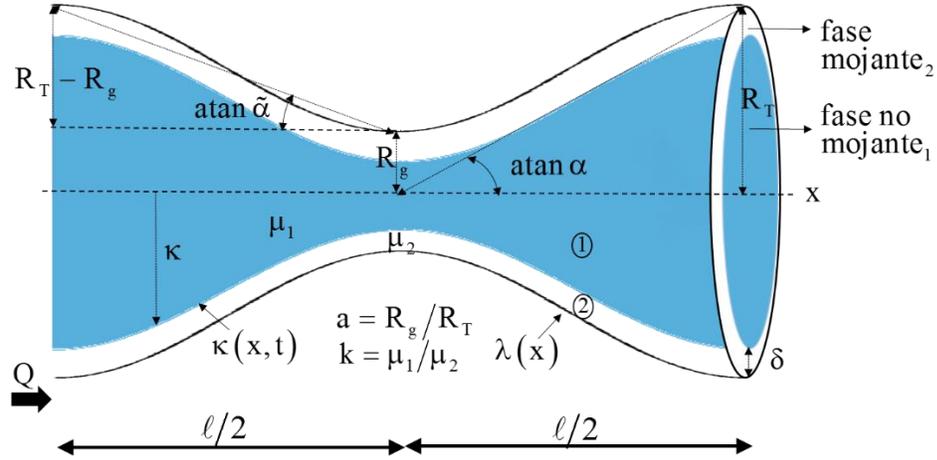


Figura 3.1 Esquema geométrico de capilares circulares con constricción y configuración de las fases líquidas. Los elementos geométricos principales son el radio del capilar, R_T ; el radio de garganta, R_g ; la longitud entre capilares, ℓ . La configuración de las fases consiste en un flujo núcleo-anular, en el que la fase externa (con índice 2), de espesor constante δ y viscosidad μ_2 , moja a la pared del poro, esta última descrita por $\lambda(x)$; y la fase interna, de viscosidad μ_1 , es rodeada por la fase externa, con la cual comparte la interfase $\kappa(x,t)$. Adicionalmente se esquematizan algunas variables de interés, como son la pendiente de la pared de poro, α , y el gradiente geométrico, $\tilde{\alpha}$. El flujo volumétrico, Q , se considera de izquierda a derecha.

Se utiliza la siguiente función sinusoidal, en su forma dimensional, para representar la geometría de capilares simétricos con garganta:

$$\lambda(x) = \frac{1}{2} R_T \left[(1+a) - (1-a) \cos(\alpha \pi x / R_T) \right] \quad (3.1)$$

donde λ es la coordenada radial de la pared del capilar, x se refiere a la variable espacial que tiene su origen en el centro de la garganta del capilar, a es la razón entre los radios de garganta (R_g) y capilar (R_T) y α es un parámetro geométrico que representa el cociente entre el radio del capilar (R_T) y la mitad de la longitud

de onda, $\alpha = R_T/(\ell/2)$, como se indica en la Figura 3.1. El parámetro α , también nombrado pendiente de pared de poro (Beresnev y Deng, 2010; Gauglitz y Radke, 1990), no considera el radio de garganta, por lo que no es totalmente representativo de la geometría del capilar. Aquí se introduce el parámetro $\tilde{\alpha}$, que relaciona la longitud de onda y ambos radios de la forma $\tilde{\alpha} = (R_T - R_g)/(\ell/2)$, el cual representa el gradiente geométrico de la pared de poro (ver Figura 3.1). De tal forma que la función sinusoidal resulta:

$$\lambda(x) = \frac{1}{2}R_T \left\{ (1+a) - (1-a) \cos \left[\frac{\tilde{\alpha}\pi x}{(1-a)R_T} \right] \right\} \quad (3.2)$$

3.2 Modelos de rompimiento de gota

Las ecuaciones fundamentales de los modelos de rompimiento de gota que aquí se exponen son las de Navier-Stokes simplificadas para flujo incompresible y laminar, la ley de conservación de masa, la ecuación de continuidad y la de Young-Laplace.

El problema del rompimiento de gota requiere determinar el cambio de posición de la interfase $\kappa(x,t)$ a través del tiempo t , $\partial\kappa/\partial t$. Por lo que, como se muestra en los siguientes apartados, las ecuaciones gobernantes se combinan para establecer una ecuación de evolución que describe la dinámica de la posición de la interfase. Esta ecuación de evolución se deriva de la expresión matemática de conservación de la masa, la cual relaciona la tasa de cambio del volumen de alguna de las fases (Q_+) con el flujo volumétrico diferencial de la forma:

$$\left(\frac{\partial Q_+}{\partial x} \right) dx = -2\pi\kappa \frac{\partial\kappa}{\partial t} dx \quad (3.3)$$

la cual puede reescribirse como:

$$\frac{\partial\kappa}{\partial t} = -\frac{1}{2\pi\kappa} \left(\frac{\partial Q_+}{\partial x} \right) \quad (3.4)$$

De tal manera que para cerrar la ecuación de evolución (3.4), se requiere que el flujo volumétrico de alguna de las fases (Q_+) sea expresado explícitamente a través de la posición radial de la interfase κ . Así, los apartados siguientes tratan sobre la formulación matemática utilizada en cada uno de los modelos de rompimiento de gota para determinar la ecuación de evolución correspondiente, basada en el establecimiento de una expresión del flujo volumétrico con las características arriba descritas.

3.2.1 Modelo de Gauglitz y Radke (GR) para interfase gas-líquido

En el capilar, el flujo rectilíneo se describe con las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo laminar incompresible, en coordenadas cilíndricas:

$$-\frac{\partial P_1}{\partial x} + \mu_1 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_1}{\partial r} \right) = 0 \quad (3.5)$$

$$-\frac{\partial P_2}{\partial x} + \mu_2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_2}{\partial r} \right) = 0 \quad (3.6)$$

donde P es la presión, x es la variable espacial, μ es la viscosidad dinámica, r es la coordenada radial, u es la velocidad y los subíndices 1 y 2 se refieren a la fase mojante y no mojante, respectivamente.

El modelo de Gauglitz y Radke (1990) considera como nula la viscosidad de la fase no mojante ($\mu_1 = 0$), que es el caso de las dispersiones gas/líquido llamadas espumas. Bajo estas condiciones, el desarrollo matemático se centra en la fase mojante. Para obtener el perfil de velocidades de esta fase se integra dos veces la ecuación (3.6), lo que resulta en:

$$u_2 = \frac{r^2}{4\mu_2} \frac{\partial P_2}{\partial x} + c_1 \ln(r) + c_2 \quad (3.7)$$

aquí c_1 y c_2 son las constantes de integración.

Las condiciones de frontera tienen que ver con el no deslizamiento en la pared del poro y esfuerzo cortante nulo en la interfase:

$$r = \lambda \quad ; \quad u_2 = 0 \quad (3.8)$$

$$r = \kappa \quad ; \quad \mu_2 \frac{du_2}{dr} = 0 \quad (3.9)$$

Por otra parte, la formulación del modelo establece presión constante e igual a cero en la fase no mojante, $P_1 = 0$, lo que permite utilizar una expresión explícita para la presión absoluta en la fase mojante, P_2 , con base en la curvatura de la interfase. La presión se determina, entonces, con una aproximación de la ecuación exacta de Young-Laplace:

$$P_c = P_1 - P_2 = -P_2 = \sigma \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{\partial^2 \kappa}{\partial X^2} \right) \quad (3.10)$$

donde σ es la tensión superficial. O bien, en forma diferencial:

$$\frac{\partial P_2}{\partial X} = \sigma \left(\frac{1}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial X} + \frac{\partial^3 \kappa}{\partial X^3} \right) \quad (3.11)$$

Entonces, sustituyendo (3.8) y (3.11) en (3.7) se obtiene la expresión de una de las constantes de integración:

$$c_2 = -\frac{\lambda^2}{4\mu_2} \sigma \left(\frac{1}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial X} + \frac{\partial^3 \kappa}{\partial X^3} \right) - c_1 \ln(\lambda) \quad (3.12)$$

De igual forma, si se escribe (3.9) y (3.11) en (3.7) resulta:

$$c_1 = -\frac{\kappa^2}{2\mu_2} \sigma \left(\frac{1}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial X} + \frac{\partial^3 \kappa}{\partial X^3} \right) \quad (3.13)$$

Obtenidas las constantes de integración, dadas por (3.12) y (3.13), la expresión del perfil de velocidad, después de ciertas reducciones algebraicas, queda:

$$u_2 = \frac{1}{2\mu_2} \sigma \left(\frac{1}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial x} + \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \right) \left[\kappa^2 \ln \left(\frac{\lambda}{r} \right) + \frac{r^2 - \lambda^2}{2} \right] \quad (3.14)$$

El flujo volumétrico de la fase mojante, Q_2 , se calcula integrando el perfil de velocidades en los límites de esta fase:

$$Q_2 = 2\pi \int_{\kappa}^{\lambda} r u_2 dr = \frac{\pi \sigma}{\mu_2} \left(\frac{\partial \kappa}{\partial x} + \kappa^2 \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \right) \left[\frac{\lambda^2}{2} - \frac{\lambda^4}{8\kappa^2} - \frac{\kappa^2}{2} \ln \left(\frac{\lambda}{\kappa} \right) - \frac{3\kappa^2}{8} \right] \quad (3.15)$$

La ecuación (3.15) expresa explícitamente el flujo volumétrico a través de la posición de la interfase $\kappa(x,t)$; nótese que el resto de las variables están determinadas por la geometría del capilar [$\lambda(x)$], y por la reología de los fluidos (μ_2 y σ). Entonces, la ecuación de evolución del modelo GR, en su forma dimensional, que describe el cambio de la posición de la interfase a través del tiempo, resulta de substituir (3.15) en la ecuación de evolución genérica (3.4):

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} = -\frac{\sigma}{2\kappa\mu_2} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left(\frac{\partial \kappa}{\partial x} + \kappa^2 \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \right) \left[\frac{\lambda^2}{2} - \frac{\lambda^4}{8\kappa^2} - \frac{\kappa^2}{2} \ln \left(\frac{\lambda}{\kappa} \right) - \frac{3\kappa^2}{8} \right] \right\} \quad (3.16)$$

La adimensionalización de las variables se realiza de acuerdo con las ecuaciones siguientes:

$$\begin{aligned} r^* &= r/R_T & x^* &= x/R_T & \tau^* &= t/(3\mu_2 R_T/\sigma) & P^* &= P/(\sigma/R_T) & Q^* &= Q/(\sigma R_T^2/\mu_2) \\ \kappa^* &= \kappa/R_T & \lambda^* &= \lambda/R_T & \delta^* &= \delta/R_T & & & L &= \ell/R_T \end{aligned} \quad (3.17)$$

La ecuación de evolución adimensional del modelo GR conforme a (3.17) y con el álgebra intervenida omitida, queda:

$$\frac{\partial \kappa^*}{\partial \tau^*} = -\frac{3}{16\kappa^*} \frac{\partial}{\partial X^*} \left\{ \left(\frac{1}{\kappa^{*2}} \frac{\partial \kappa^*}{\partial X^*} + \frac{\partial^3 \kappa^*}{\partial X^{*3}} \right) \left[4\lambda^{*2}\kappa^{*2} - \lambda^{*4} - 4\ln\left(\frac{\lambda^*}{\kappa^*}\right)\kappa^{*4} - 3\kappa^{*4} \right] \right\} \quad (3.18)$$

En su formulación, los autores consideran también el enfoque película delgada de Hammond (1983), el cual establece que el espesor de la fase mojanete, $\delta^* = \lambda^* - \kappa^*$, es pequeño (teoría de lubricación), es decir $\delta^* \ll \lambda^*$. Con base en esta suposición, el segundo término de la derivada en (3.18) se puede escribir en términos de δ^* y si se utiliza la expansión de Newton para el término logarítmico, la ecuación resultante es:

$$\frac{\partial \kappa^*}{\partial \tau^*} = -\frac{3}{16\kappa^*} \frac{\partial}{\partial X^*} \left[\left(\frac{1}{\kappa^{*2}} \frac{\partial \kappa^*}{\partial X^*} + \frac{\partial^3 \kappa^*}{\partial X^{*3}} \right) \left(\frac{16\lambda^{*3}\delta^{*3}}{3} + \frac{8\delta^{*6}}{3\lambda^{*2}} + \frac{8\delta^{*7}}{3\lambda^{*3}} + \frac{\delta^{*8}}{\lambda^{*4}} - \frac{16\delta^{*4}}{3} \right) \right] \quad (3.19)$$

Entonces, si se toman solamente los términos de δ^* orden tres o menores, finalmente la ecuación de evolución del modelo GR se reduce a:

$$\frac{\partial \kappa^*}{\partial \tau^*} = -\frac{1}{\kappa^*} \frac{\partial}{\partial X^*} \left\{ \left(\frac{1}{\kappa^{*2}} \frac{\partial \kappa^*}{\partial X^*} + \frac{\partial^3 \kappa^*}{\partial X^{*3}} \right) \left[\lambda^* (\lambda^* - \kappa^*)^3 \right] \right\} \quad (3.20)$$

3.2.2 Modelo de Hoyer (HE) para interfase gas-líquido elástica

El modelo que reportan Hoyer *et al.* (2016) es una extensión del modelo GR, en el que se incluye esfuerzos interfaciales elásticos propios de interfases complejas. La formulación matemática del modelo HE es similar al GR, por lo que se hará hincapié en las modificaciones que tienen que ver con el comportamiento elástico de la interfase.

La solución general del perfil de velocidades de la fase mojanete se determina de igual forma que en el modelo GR [ecuaciones (3.5) a (3.7)]. Además se conserva condición de frontera de no deslizamiento en la pared de poro [ecuación (3.8)]. En cuanto a la condición de frontera en la interfase, se considera que el esfuerzo cortante equilibra el esfuerzo superficial neto en la dirección axial, T_{xx} :

$$r = \kappa \quad ; \quad \mu_2 \frac{du_2}{dr} = \frac{dT_{xx}}{dx} \quad (3.21)$$

Los esfuerzos superficiales principales en las dirección azimutal y axial, $T_{\theta\theta}$ y T_{xx} , están definidos por las siguientes ecuaciones constitutivas lineales:

$$T_{\theta\theta} = \sigma + K\varepsilon_{\theta\theta} \quad (3.22)$$

$$T_{xx} = \sigma + K\varepsilon_{xx} \quad (3.23)$$

donde K es la elasticidad interfacial dilatacional y las deformaciones superficiales principales en la interfase, $\varepsilon_{\theta\theta}$ y ε_{xx} , están dadas por las siguientes relaciones geométricas:

$$\varepsilon_{\theta\theta} = \frac{\kappa}{\kappa_0} - 1 \quad (3.24)$$

$$\varepsilon_{xx} = \sqrt{(\partial\kappa/\partial x)^2 + 1} - 1 \quad (3.25)$$

donde $\kappa_0 = \kappa(x,0)$.

Al igual que en el modelo GR, la presión de la fase mojante, P_2 , se considera constante e igual a cero, de tal forma que puede ser escrita explícitamente en términos de la aproximación pendiente pequeña de la ecuación de Young-Laplace, teniendo en cuenta los esfuerzos superficiales:

$$P_2 = - \left[\sigma + K \left(\frac{\kappa}{\kappa_0} - 1 \right) \right] \frac{1}{\kappa} + \left[\sigma + K \left(\sqrt{(\partial\kappa/\partial x)^2 + 1} - 1 \right) \right] \frac{\partial^2 \kappa}{\partial x^2} \quad (3.26)$$

o en su forma diferencial:

$$\frac{\partial P_2}{\partial x} = \frac{(\sigma - K)}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial x} + \frac{K}{\sqrt{(\partial\kappa/\partial x)^2 + 1}} \frac{\partial \kappa}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial x^2} \right)^2 + \left[\sigma + K \left(\sqrt{(\partial\kappa/\partial x)^2 + 1} - 1 \right) \right] \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \quad (3.27)$$

Nótese que si $K = 0$ (caso inelástico), el gradiente de presión de la fase mojanete toma la forma presentada en el modelo GR [ecuación (3.11)].

Las constantes de integración del perfil de velocidad de la ecuación (3.7) se obtienen al combinar esta última con las condiciones de frontera (3.8) y (3.21) con (3.27). Como resultado se obtiene el perfil de velocidades de la fase mojanete para el modelo HE:

$$u_2 = \frac{K}{\mu_2} \frac{\kappa}{\sqrt{(\partial\kappa/\partial x)^2 + 1}} \frac{\partial\kappa}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\kappa}{\partial x^2} \right) \ln\left(\frac{r}{\lambda}\right) + \frac{1}{2\mu_2} \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{(\sigma - K)}{\kappa^2} \frac{\partial\kappa}{\partial x} + \frac{K}{\sqrt{(\partial\kappa/\partial x)^2 + 1}} \frac{\partial\kappa}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\kappa}{\partial x^2} \right)^2 \right] \left[\kappa^2 \ln\left(\frac{\lambda}{r}\right) + \frac{r^2 - \lambda^2}{2} \right] \\ & + \left[\sigma + K \left(\sqrt{(\partial\kappa/\partial x)^2 + 1} - 1 \right) \right] \frac{\partial^3\kappa}{\partial x^3} \end{aligned} \right\} \quad (3.28)$$

Después, el flujo volumétrico de la fase mojanete se obtiene integrando el perfil de velocidades entre los límites correspondientes:

$$Q_2 = 2\pi \int_{\kappa}^{\lambda} r u_2 dr = \frac{\pi\sigma}{8\mu_2} \left(\frac{\partial\kappa}{\partial x} + \kappa^2 \frac{\partial^3\kappa}{\partial x^3} \right) \left[\left(\frac{K}{\sigma} - 1 \right) \left(\frac{\lambda^4}{\kappa^2} \right) \left\{ 1 - 4 \left(\frac{\kappa}{\lambda} \right)^2 + \left[3 - 4 \ln\left(\frac{\kappa}{\lambda} \right) \right] \left(\frac{\kappa}{\lambda} \right)^4 \right\} \right] + \frac{K}{\sigma} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\partial\kappa^2}{\partial x}}} \left[\begin{aligned} & 4\lambda^2\kappa \left\{ -1 + \left[1 - 2 \ln\left(\frac{\kappa}{\lambda} \right) \right] \left(\frac{\kappa}{\lambda} \right)^2 \right\} \left(\frac{\partial\kappa}{\partial x} \frac{\partial^2\kappa}{\partial x^2} \right) \\ & - \lambda^4 \left\{ 1 - 4 \left(\frac{\kappa}{\lambda} \right)^2 + \left[3 - 4 \ln\left(\frac{\kappa}{\lambda} \right) \right] \left(\frac{\kappa}{\lambda} \right)^4 \right\} \left[\frac{\partial\kappa}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\kappa}{\partial x^2} \right)^2 + \left(1 + \frac{\partial\kappa^2}{\partial x} \right) \frac{\partial^3\kappa}{\partial x^3} \right] \end{aligned} \right] \quad (3.29)$$

Para adimensionalizar se toman la misma parametrización que en (3.17), y se agregan las siguientes:

$$\tau_{\theta\theta} = T_{\theta\theta}/\sigma \quad ; \quad \tau_{xx} = T_{xx}/\sigma \quad ; \quad K^* = K/\sigma \quad (3.30)$$

Finalmente, la ecuación de evolución del modelo HE, en su forma adimensional, resulta de escribir (3.29) en (3.4) y adimensionalizar de acuerdo con (3.17) y (3.30):

$$\frac{\partial \kappa^*}{\partial \tau^*} = -\frac{3}{16\kappa^*} \frac{\partial}{\partial x^*} \left\{ \left(\frac{1}{\kappa^{*2}} \frac{\partial \kappa^*}{\partial x^*} + \frac{\partial^3 \kappa^*}{\partial x^{*3}} \right) \left[-4\lambda^{*2} \kappa^{*2} + \lambda^{*4} + 4 \ln \left(\frac{\lambda^*}{\kappa^*} \right) \kappa^{*4} + 3\kappa^{*4} \right] \right\} +$$

$$\frac{\partial}{\partial x^*} \left[\frac{K^*}{\sqrt{1 + \frac{\partial \kappa^{*2}}{\partial x^*}}} \left\{ 4\lambda^{*2} \kappa^* \left\{ -1 + \left[1 - 2 \ln \left(\frac{\kappa^*}{\lambda^*} \right) \right] \left(\frac{\kappa^*}{\lambda^*} \right)^2 \right\} \left(\frac{\partial \kappa^*}{\partial x^*} \frac{\partial^2 \kappa^*}{\partial x^{*2}} \right) - \right. \right.$$

$$\left. \left. \lambda^{*4} \left\{ 1 - 4 \left(\frac{\kappa^*}{\lambda^*} \right)^2 + \left[3 - 4 \ln \left(\frac{\kappa^*}{\lambda^*} \right) \right] \left(\frac{\kappa^*}{\lambda^*} \right)^4 \right\} \left[\frac{\partial \kappa^*}{\partial x^*} \left(\frac{\partial^2 \kappa^*}{\partial x^{*2}} \right)^2 + \left(1 + \frac{\partial \kappa^{*2}}{\partial x^*} \right) \frac{\partial^3 \kappa^*}{\partial x^{*3}} \right] \right\} \right]$$

(3.31)

Cabe mencionar, que si se toma $K^* = 0$ (caso inelástico), la ecuación de evolución se reduce a la (3.18), que corresponde al modelo GR.

3.2.3 Modelo de Beresnev y Deng (BD) para interfase líquido-líquido

El modelo de Beresnev y Deng (2010) establece su formulación para fluidos de viscosidad arbitraria y distinta de cero, por lo que se utiliza para interfaces líquido-líquido, como es el caso que se presenta en la configuración de una emulsión.

Ya que las viscosidades de las fases no son despreciables, la asunción de presión constante e igual a cero de una de las fases no es válida; por lo que la ecuación de Young-Laplace sólo proporciona la diferencia de presiones entre los dos fluidos:

$$P_c = P_1 - P_2 = \sigma \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{\partial^2 \kappa}{\partial x^2} \right) \quad (3.32)$$

o diferenciando y despejando uno de los gradientes de presión:

$$\frac{\partial P_1}{\partial x} = \frac{\partial P_2}{\partial x} - \sigma \left(\frac{1}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial x} - \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \right) \quad (3.33)$$

Entonces, como el número de variables aumenta en este sistema de flujo, la formulación matemática del modelo no sólo se enfoca en una fase sino que ahora intervienen las ecuaciones de ambas. Al igual que en los modelos para interfaces gas-líquido, en el modelo BD el flujo rectilíneo es descrito con las ecuaciones de Navier-Stokes simplificadas en coordenadas cilíndricas [ecuaciones (3.5) y (3.6)], las cuales se resuelven para las siguientes condiciones de frontera:

$$r = 0 \quad ; \quad \frac{du_1}{dr} = 0 \quad (3.34)$$

$$r = \kappa \quad ; \quad \mu_1 \frac{du_1}{dr} = \mu_2 \frac{du_2}{dr} \quad (3.35)$$

$$r = \kappa \quad ; \quad u_1 = u_2 \quad (3.36)$$

$$r = \lambda \quad ; \quad u_2 = 0 \quad (3.37)$$

La primera condición de frontera, ecuación (3.34), se establece al considerar que el flujo es axisimétrico, por lo que la derivada del vector de velocidad en dirección radial en el eje de simetría axial del capilar es igual a cero. En la interfase se postula la continuidad del esfuerzo cortante y de las velocidades [ecuaciones (3.35) y (3.36)]; es decir, condiciones de no deslizamiento. La última condición, ecuación (3.37), postula que en la pared del capilar la velocidad es nula. Al aplicar las condiciones de frontera descritas, se obtienen los perfiles de velocidad correspondientes a cada fase:

$$u_1 = \frac{1}{4\mu_1} \frac{\partial P_1}{\partial x} (r^2 - \kappa^2) + \frac{1}{4\mu_2} \frac{\partial P_2}{\partial x} (\kappa^2 - \lambda^2) + \frac{\kappa^2}{2\mu_2} \left(\frac{\partial P_1}{\partial x} - \frac{\partial P_2}{\partial x} \right) \ln \left(\frac{\kappa}{\lambda} \right) \quad (3.38)$$

$$u_2 = \frac{1}{4\mu_2} \frac{\partial P_2}{\partial x} (r^2 - \lambda^2) + \frac{\kappa^2}{2\mu_2} \left(\frac{\partial P_1}{\partial x} - \frac{\partial P_2}{\partial x} \right) \ln \left(\frac{r}{\lambda} \right) \quad (3.39)$$

A diferencia de las ecuaciones del perfil de velocidades para el caso de interfaces líquido-gas, aquí las expresiones dependen de ambos gradientes de presión, los cuales son desconocidos y diferentes de cero. Para reducir el número

de variables se substituye (3.33) en (3.38) y (3.39), con lo que los perfiles de velocidad quedan en función sólo del gradiente $\partial P_2/\partial x$. Después, de forma similar que en (3.15) y (3.29), el flujo volumétrico se obtiene al integrar el perfil de velocidades entre los límites de la fase, resultando:

$$Q_1 = -\frac{\pi\kappa^4}{16\mu_1} \left[\frac{\partial P_2}{\partial x} - \sigma \left(\frac{1}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial x} - \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \right) \right] + \frac{\pi}{4\mu_2} \frac{\partial P_2}{\partial x} \left(\frac{\kappa^4 - \lambda^2 \kappa^2}{2} \right) + \frac{\pi\kappa^4}{4\mu_2} \ln \left(\frac{\kappa}{\lambda} \right) \quad (3.40)$$

$$Q_2 = -\frac{\pi}{4\mu_2} \left[\frac{\lambda^4}{2} - \kappa^2 \lambda^2 + \frac{\kappa^4}{2} \frac{\partial P_2}{\partial x} \right] + \frac{\pi\kappa^2\sigma}{4\mu_2} \left(\frac{1}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial x} - \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \right) \left[\lambda^2 + 2\kappa^2 \left(\ln \frac{\kappa}{\lambda} - 1 \right) \right] \quad (3.41)$$

Se agrega al análisis la ecuación de continuidad, asumiendo que la densidad de las fases es similar, lo cual implica que:

$$Q_1 + Q_2 = Q \quad (3.42)$$

donde Q es el flujo volumétrico total impuesto en el capilar.

Las ecuaciones del flujo volumétrico, (3.40) y (3.41), se escriben en la ecuación de continuidad, (3.42), y después se resuelve para $\partial P_2/\partial x$:

$$\frac{\partial P_2}{\partial x} = \frac{Q}{\frac{\pi}{8} \left(\frac{\kappa^4 - \lambda^4}{\mu_2} - \frac{\kappa^4}{\mu_1} \right)} + \frac{\sigma \left(\frac{1}{\kappa^2} \frac{\partial \kappa}{\partial x} + \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \right) \left(\frac{2(\kappa^4 - \kappa^2 \lambda^2)}{\mu_2} - \frac{\kappa^4}{\mu_1} \right)}{\left(\frac{\kappa^4 - \lambda^4}{\mu_2} - \frac{\kappa^4}{\mu_1} \right)} \quad (3.43)$$

Con esta última ecuación, las ecuaciones de flujo volumétrico de cada fluido pueden ser escritas explícitamente a través del radio de interfase, condición indispensable para cerrar la ecuación de evolución. Por ejemplo, para la fase no mojannte la expresión es:

$$Q_1 = \frac{Q \left[\frac{2(\kappa^4 - \kappa^2 \lambda^2)}{\mu_2} - \frac{\kappa^4}{\mu_1} \right]}{\left(\frac{\kappa^4 - \lambda^4}{\mu_2} - \frac{\kappa^4}{\mu_1} \right)} + \frac{\pi \sigma \kappa^2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial x} + \kappa^2 \frac{\partial^3 \kappa}{\partial x^3} \right)}{8} \left[\frac{\kappa^4 \left(\frac{2 \left(1 - \frac{\lambda^2}{\kappa^2} \right)}{\mu_2} - \frac{1}{\mu_1} \right)^2}{\left(\frac{\kappa^4 - \lambda^4}{\mu_2} - \frac{\kappa^4}{\mu_1} \right)} + \left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{4}{\mu_2} \ln \frac{\lambda}{\kappa} \right) \right] \quad (3.44)$$

La adimensionalización se hace con base en la siguiente parametrización:

$$\begin{aligned} r^* &= r/R_T ; \quad x^* = x/R_T ; \quad \tau^* = t/(\mu_1 R_T / \sigma) ; \quad P^* = P/(\sigma/R_T) ; \quad Ca = Q/(\sigma \pi R_T^2 / \mu_2) \\ \kappa^* &= \kappa/R_T ; \quad \lambda^* = \lambda/R_T ; \quad \delta^* = \delta/R_T \end{aligned} \quad (3.45)$$

Finalmente, la ecuación del modelo BD se obtiene al adimensionalizar (3.44) de acuerdo con (3.45) , para después substituir la expresión resultante en la ecuación de evolución genérica (3.4), resultando:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \kappa^*}{\partial \tau^*} &= -\frac{Ca}{2\kappa^*} \frac{\partial}{\partial x^*} \left[\frac{1 + 2 \frac{\mu_1}{\mu_2} \left(\frac{\lambda^{*2}}{\kappa^{*2}} - 1 \right)}{\frac{\lambda^{*4}}{\kappa^{*4}} + \frac{\mu_2}{\mu_1} - 1} \right] + \\ &\frac{1}{4\kappa^*} \frac{\partial}{\partial x^*} \left[\kappa^{*2} \left(\frac{\partial \kappa^*}{\partial x^*} + \kappa^{*2} \frac{\partial^3 \kappa^*}{\partial x^{*3}} \right) \left\{ \frac{\left(\frac{\lambda^{*2}}{\kappa^{*2}} - 1 \right) \left[\left(\frac{\mu_1}{\mu_2} - \frac{1}{4} \right) \frac{\lambda^{*2}}{\kappa^{*2}} + \frac{3}{4} - \frac{\mu_1}{\mu_2} \right]}{\frac{\lambda^{*4}}{\kappa^{*4}} + \frac{\mu_2}{\mu_1} - 1} - \frac{\mu_1}{\mu_2} \ln \frac{\lambda^*}{\kappa^*} \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.46)$$

3.2.4 Condiciones iniciales y de frontera

Los modelos de rompimiento de gota antes expuestos consisten en ecuaciones diferenciales parciales de cuarto orden en el espacio y de primer orden en el tiempo; en consecuencia se requieren cuatro condiciones de frontera y una

condición inicial para su resolución. Con las condiciones iniciales se determina el espesor adimensional de la fase mojanante al inicio de la simulación $\delta^*(x^*, 0)$ y por lo tanto el espesor de la interfase, es decir $\kappa(x^*, 0) = \lambda(x^*) - \delta^*$. Dicho espesor se considerará constante en todas las simulaciones aquí realizadas. En las condiciones de frontera se establece el estado del sistema en los límites del dominio, es decir en $x^* = -L/2$ y $x^* = L/2$, para todo el intervalo de tiempo.

De acuerdo con las observaciones realizadas en estudios experimentales de microfluídica, el espesor δ^* de la película delgada de la fase mojanante, que se forma en la pared del capilar después de que ésta es desplazada por otro fluido, está gobernado principalmente por el balance entre las fuerzas viscosas y de tensión superficial; es decir, por el número capilar Ca (Roman *et al.*, 2017). En los modelos para interfases líquido-gas, GR y HE, este espesor se calcula con la formulación empírica de Bretherton (1961):

$$\delta^* = 1.337Ca^{2/3} \quad (3.47)$$

Beresnev *et al.* (2011b) desarrollaron una teoría hidrodinámica para estimar el espesor δ^* en sistemas líquido-líquido y realizaron una serie de experimentos para validarla. Por su parte, Deng *et al.* (2015) compilaron los resultados experimentales de estos autores y los ajustaron a la siguiente relación:

$$\delta^* = 0.0412\log_{10}(Ca) + 0.1473 \quad (3.48)$$

Esta última expresión es válida en el rango $3 \times 10^{-4} \leq Ca \leq 1 \times 10^{-2}$ y será utilizada para establecer las condiciones iniciales en el modelo BD, es decir cuando se trate de interfases líquido-líquido.

En los modelos GR y HE se establece la simetría del problema con respecto al plano $x = 0$, bajo el supuesto de que la gota está centrada en el capilar, por lo que sólo es necesario resolver el problema en la mitad del dominio. Lo anterior implica que en esta nueva frontera:

$$\left. \frac{\partial \kappa^*}{\partial x^*} \right|_{x^*=0} = \left. \frac{\partial^3 \kappa^*}{\partial x^{*3}} \right|_{x^*=0} = 0 \quad (3.49)$$

Por otra parte, en algún punto alejado de la constricción, $x^* = d_e$, se asume que la interfase permanece sin modificaciones en su posición. Entonces, se establece la frontera $x^* = d_e$, en la que la posición de la interfase y su primera derivada permanecen constantes durante todo el tiempo:

$$\kappa^*(d_e, \tau) = \lambda^*(d_e) - \delta^* \quad (3.50)$$

$$\left. \frac{\partial \kappa^*(x^*, \tau)}{\partial x^*} \right|_{x^*=d_e} = \left. \frac{\partial \lambda^*(x^*)}{\partial x^*} \right|_{x^*=d_e} \quad (3.51)$$

Cabe señalar que la determinación de la posición de la frontera, d_e , requiere la ejecución de varias simulaciones con distintas condiciones de flujo, considerando $d_e = \pm L/2$, para después establecer el punto a partir del cual no se observan cambios en la posición de la interfase para ninguno de los casos.

En cuanto al modelo BD, las condiciones de frontera se establecen periódicas para evitar reflexiones artificiales en la frontera (Beresnev y Deng, 2010), de tal forma que para todo el tiempo de simulación la posición de la interfase coincide en las fronteras:

$$\kappa^*(-L/2, \tau) = \kappa^*(L/2, \tau) \quad (3.52)$$

3.3 Resumen del Capítulo

Tal como su nombre lo indica, en este Capítulo se desarrolla la formulación matemática para la obtención de los modelos de rompimiento de gota que ocurre durante el flujo bifásico en capilares circulares con constricción cuya geometría es descrita por una función sinusoidal. Dicha formulación se sustenta en dos enfoques teóricos fundamentales: el de película delgada (Hammond, 1983) y el de pendiente

pequeña (Gauglitz y Radke, 1988). El problema del rompimiento de gota requiere determinar el cambio de posición de la interfase a través del tiempo por lo que toda la formulación parte de una expresión matemática derivada del principio de conservación de la masa [Ec. (3.3)], la cual requiere una ecuación explícita del flujo volumétrico como función de la posición radial de la interfase. Para obtener dicha expresión se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo laminar incompresible, en coordenadas cilíndricas y se añaden a la formulación las ecuaciones de Young-Laplace, la de continuidad cuando se trata de interfases líquido-líquido, y relaciones que definen los esfuerzos superficiales en el caso de interfases elásticas.

Como resultado de la formulación matemática, se obtienen tres modelos de rompimiento de gota, en su forma adimensional: GR para sistemas gas-líquido [Ec. (3.20)], HE para intarfases gas-líquido elásticas [Ec. (3.31)] y BD para el caso en que ambas fases son líquidas [Ec. (3.46)]. Estos modelos consisten en ecuaciones diferenciales parciales altamente no lineales de cuarto orden en el espacio y de primer orden en el tiempo, cuya solución se plantea en el Capítulo IV.

IV.MÉTODOS NUMÉRICOS

El presente Capítulo tiene como principales objetivos describir las técnicas numéricas utilizadas para resolver los modelos matemáticos de rompimiento de gota presentados en el Capítulo III y exponer la metodología con la que se analizan las condiciones límites de flujo en las que se inhibe el rompimiento de gota. En el subcapítulo 4.1 y sus secciones se exponen brevemente, a manera de introducción a los métodos de diferencias finitas, algunas técnicas numérica con las que otros autores han solucionado los modelos de rompimiento de gota, para posteriormente hacer énfasis en un marco de trabajo propio, basado en métodos espectrales con la transformada discreta de Fourier, en el que son resueltos todos los modelos. Mientras que en 4.2 y las secciones contenidas en este subcapítulo, se trata el problema de la determinación *a priori* de las condiciones de flujo en las que ocurre o se inhibe el rompimiento de gota. Para esto se proponen una serie de formulaciones empíricas que involucran las variables físicas del sistema de flujo y parámetros de ajuste que son optimizados usando métodos evolutivos.

4.1 Métodos numéricos para resolver los modelos de rompimiento de gota

Los modelos de rompimiento de gota presentados en el Capítulo tercero consisten en ecuaciones diferenciales parciales altamente no lineales de cuarto orden en el espacio y de primer orden en el tiempo, cuya solución analítica puede resultar muy compleja si no se realizan simplificaciones, por lo cual se optó por la utilización de técnicas numéricas para su resolución.

Aunque se ha reportado la solución numérica de estos modelos, los métodos con el que se resuelven unos no siempre aplican para la resolución de otros, o no están disponibles al ser parte de *softwares* comerciales. Por ejemplo el modelo propuesto por Hoyer *et al.* (2016) es resuelto usando el método de Euler explícito, mientras que Gauglitz y Radke (1990) solucionan su modelo con el método de elemento finito de Galerkin. Por su parte, Beresnev *et al.* (2009) y Deng *et al.* (2014)

utilizan modelos de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) como FLUENT® y COMSOL® para validar sus planteamientos teóricos sobre criterios de ruptura de gota y analizar los tiempos en que ésta ocurre. El *software* ANSYS FLUENT® usa el método de Volúmenes Finitos para discretizar las ecuaciones gobernantes, mientras que COMSOL® utiliza Elemento Finito; para rastrear la posición de la interfase el primero se basa en la técnica de Volumen de Fluidos y el segundo en el método *Level-set*. Beresnev y Deng (2010) y Deng *et al.* (2015) resuelven el modelo propuesto por los primeros, empleando el Método de Líneas implementado en MATHEMATICA®.

Como parte de esta tesis, se propone un esquema de trabajo unificador basado en la utilización de un método pseudo-espectral con la transformada discreta de Fourier, con el cual son obtenidas las soluciones del conjunto de los modelos de rompimiento de gota. No obstante, se exponen brevemente, a manera de introducción a los métodos espectrales, algunas de las técnicas numéricas antes mencionadas y que tienen su fundamento en las diferencias finitas, en que las técnicas pseudo-espectrales son el caso límite.

4.1.1 Matriz de diferenciación con diferencias finitas

El método de diferencias finitas para resolver ecuaciones diferenciales consiste esencialmente en la aproximación de las derivadas de la función por medio de las diferencias de los valores que adquiere ésta en un número finito de puntos del dominio, llamados nodos. De esta forma, la ecuación diferencial se transforma en un sistema de ecuaciones algebraicas en el que las incógnitas son los valores de la función en dichos nodos.

La aproximación de una función y sus derivadas se puede obtener considerando la expansión en series de Taylor para diferentes órdenes de truncamiento. Así, la aproximación de la derivada de orden d con error de orden p , de una función $F(x)$ se escribe (Eberly, 2008):

$$F^{(d)}(x_j) = \frac{d!}{h^d} \sum_{i=i_{\min}}^{i_{\max}} C_i F(x_{j+i}) + O(h^p) \quad (4.1)$$

donde x es la variable independiente, i es un contador que va desde i_{\min} hasta i_{\max} y j es el índice del nodo donde se evalúa la derivada. Los coeficientes C_i se obtienen a través de un sistema de $d+p$ ecuaciones, en el que la ecuación $n = 0, 1, \dots, d+p-1$ se determina con:

$$\sum_{i=i_{\min}}^{i_{\max}} i^n C_i = \begin{cases} 0, & 0 \leq n \leq d+p-1 \text{ y } n \neq d \\ 1, & n = d \end{cases} \quad (4.2)$$

en la que la aproximación es hacia adelante si se considera que $i_{\min} = 0$ y $i_{\max} = d+p-1$; hacia atrás cuando $i_{\max} = 0$ y $i_{\min} = -(d+p-1)$; las diferencias son centradas al establecer que $i_{\max} = -i_{\min} = (d+p-1)$. Por ejemplo, para la aproximación de la primera derivada con diferencias centradas considerando un error $O(h^2)$, se tiene que $d = 1$, $p = 2$, $i_{\max} = -i_{\min} = 1$; entonces de (4.2) resulta $C = \{-1, 0, 1\} / 2$. Al escribir estos valores en (4.1) se obtiene:

$$F^{(1)}(x_j) = \frac{F(x_{j-1}) + F(x_{j+1})}{2h} + O(h^2) \quad (4.3)$$

Generalizando para todos los nodos del dominio, resulta la llamada matriz de diferenciación:

$$\begin{bmatrix} F^{(1)}(x_1) \\ \vdots \\ F^{(1)}(x_N) \end{bmatrix} = h^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 1/2 & & & -1/2 \\ -1/2 & 0 & \ddots & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 0 & 1/2 \\ 1/2 & & & -1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F(x_1) \\ \vdots \\ F(x_N) \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

De forma análoga, si en lugar de $O(h^2)$ evaluamos para $O(h^4)$ los coeficientes resultan en $C = \{1, -8, 0, 8, -1\} / 12$; por lo que la aproximación es:

función en $p_j(x_{j\pm 2}) = F(x_{j\pm 2})$, $p_j(x_{j\pm 1}) = F(x_{j\pm 1})$ y $p_j(x_{j+1}) = F(x_{j+1})$, procediendo de la forma antes descrita se llega a la aproximación dada por (4.5).

En el procedimiento de interpolación expuesto se consideraron diferencias finitas de segundo $O(h^2)$ y cuarto orden $O(h^4)$, cuyas matrices de diferenciación son tridiagonal y pentadiagonal en las que intervienen dos y cuatro nodos, respectivamente. Al extender este procedimiento para órdenes mayores, se tendrían matrices de diferenciación más densas. Los métodos espectrales, que se exponen más adelante, tienen su fundamento en llevar el proceso al límite, es decir trabajar con matrices de diferenciación de orden N , $O(h^N)$.

4.1.1.1 Método de Euler explícito

Si bien la discretización mediante diferencias finitas no establece por sí misma la solución de la ecuación diferencial, ésta puede ser utilizada para tal propósito. Tal es el caso del método de Euler explícito, también conocido como *Forward Euler* (FE), el cual básicamente consiste en la implementación de diferencias finitas hacia adelante en las derivadas de la variable temporal, mientras que en la variable espacial es válida cualquier aproximación, ya sea una diferenciación sencilla a través de diferencias finitas o más elaborada como en el caso de los métodos pseudo-espectrales.

El método FE para resolver EDO y EDP es sencillo de implementar y se expone aquí a forma de introducción a los métodos de líneas y pseudo-espectral, en los que se profundiza más adelante. Para ejemplificar el método, tomemos por ejemplo la ecuación de advección lineal:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -U \frac{\partial c}{\partial x} \quad (4.8)$$

donde c es la variable dependiente y U es un coeficiente; sujeta a la condición de frontera c_0^t y a la condicional inicial c_j^0 .

Entonces, para una aproximación espacial en diferencias finitas centradas con $O(h^2)$ y la correspondiente discretización temporal, de acuerdo con (4.1) y (4.2) se tiene:

$$\frac{c_j^{t+1} - c_j^t}{\Delta t} = -U \frac{c_{j+1}^t - c_{j-1}^t}{\Delta x} \quad (4.9)$$

Dado que en el tiempo inicial se conocen todos los valores de $c_j^{t=0}$, es posible calcular los valores que adquiere la variable dependiente en el siguiente paso de tiempo a partir de éstos:

$$c_j^{t+1} = c_j^t - \frac{\Delta t}{\Delta x} U (c_{j+1}^t - c_{j-1}^t) \quad (4.10)$$

donde $C = U\Delta t/\Delta x$ es el llamado número de Courant.

4.1.2 Método de Líneas

La idea básica del Método de Líneas (ML) es reemplazar las derivadas espaciales en la ecuación diferencial parcial (EDP) con aproximaciones algebraicas (Schiesser, 2012). Hecho esto, sólo la variable del valor inicial, típicamente el tiempo, se mantiene como la variable independiente con lo que se puede formular un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) que aproximen la ecuación diferencial parcial. El sistema resultante se resuelve como un problema de valor inicial usando cualquiera de los algoritmos existentes para este tipo de problemas, por ejemplo el ampliamente conocido método de Runge-Kutta.

De acuerdo con los preceptos del ML arriba mencionados, si en la ecuación (4.8) la derivada espacial se aproxima con diferencias finitas centradas, como en (4.9) , se obtiene el sistema de N EDOs:

$$\frac{dc_j}{dt} = -U \frac{c_{j+1} - c_{j-1}}{\Delta x} \quad (4.11)$$

El Método de Líneas está implementado en el software MATHEMATICA® (Knapp, 2008), el cual toma ventaja de los algoritmos desarrollados previamente para resolver sistemas de EDOs y que resultan ser sumamente eficientes. El software MATHEMATICA fue utilizado por Beresnev y Deng (2010) para resolver su modelo de rompimiento de gota para interfases líquido-líquido (modelo BD). Con ayuda del *software* reportan simulaciones en el orden de minutos, mientras que con modelos comerciales de CFD los tiempos computacionales requeridos son de aproximadamente un día por escenario. También fue empleado por Deng *et al.* (2015) para evaluar el modelo BD bajo diferentes escenarios de flujo en un amplio rango de geometrías de poro y así determinar el límite superior del número capilar en el que se inhibe el rompimiento de gota.

4.1.3 Diferenciación pseudo-spectral de Fourier

La idea detrás de los métodos espectrales es llevar el proceso de interpolación utilizado en las diferencias finitas al límite; es decir, trabajar con interpolantes y matrices de diferenciación de orden $N, O(h^N)$, en las que intervengan todos los nodos del dominio para la determinación de las derivadas en uno de éstos.

En estos métodos, la solución a la ecuación diferencial se expande como un interpolante global, que puede ser una función trigonométrica o un polinomio. En otros métodos, como el de diferencias finitas o el de elemento finito, la expansión involucra interpolantes locales como polinomios definidos a tramos, por lo que la exactitud en los métodos espectrales es superior (Weideman y Reddy, 2000). Sin

embargo, en lugar de trabajar con matrices de diferenciación dispersas, los métodos espectrales requieren matrices completas y restricciones de estabilidad más severas. En general, los métodos espectrales de colocación son adecuados para resolver Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) u Ordinarias (EDO) con alta precisión en dominios simples y en los casos en que los datos que definen el problema son suaves.

Se hace la diferenciación de dos enfoques dependiendo si el dominio es periódico o no periódico. El método espectral de Fourier se basa en la utilización de interpolantes trigonométricos en dominios periódicos. Mientras que para dominios no periódicos se utilizan otras funciones interpolantes como las de Chebyshev, Hermite, entre otras.

4.1.3.1 La transformada discreta de Fourier

La aproximación de una función periódica en el intervalo $[x_1, x_N]$ con periodo $Pe = x_N - x_1$, en este caso la posición de la interfase $\kappa(t, x)$, se puede realizar con la serie de Fourier en su forma discreta, la cual se define como:

$$\kappa(t, x) \approx a_0 + \sum_{m=1}^M a_m \cos(m\omega_0 x) + b_m \sin(m\omega_0 x) \quad (4.12)$$

donde M es el número de armónicas $m = 1, 2, \dots, M$ de la serie; y $\omega_0 = 2\pi/Pe$. Los coeficientes a_m y b_m están definidos por:

$$a_0 = \frac{2}{Pe} \int_{x_1}^{x_N} \kappa dx \approx \left(\frac{2}{N-1} \right) \sum_{m=1}^M \kappa_j \quad (4.13)$$

$$a_m = \frac{2}{Pe} \int_{x_1}^{x_N} \kappa \cos(m\omega_0 x) dx \approx \left(\frac{2}{N-1} \right) \sum_{m=1}^M \kappa_j \cos(m\omega_0 x_j) \quad (4.14)$$

$$b_m = \frac{2}{Pe} \int_{x_1}^{x_N} \kappa \sin(m\omega_0 x) dx \approx \left(\frac{2}{N-1} \right) \sum_{m=1}^M \kappa_j \sin(m\omega_0 x_j) \quad (4.15)$$

Otra notación empleada para escribir la serie de Fourier de una función es mediante su forma compleja:

$$\kappa(\tau, x) \approx \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m e^{im\omega_0 x} \quad (4.16)$$

donde los coeficientes c_m están definidos por:

$$c_m = \frac{1}{p} \int_{x_1}^{x_N} \kappa e^{-im\omega_0 x} dx \quad (4.17)$$

Los métodos espectrales con series de Fourier utilizan la transformada de Fourier y su inversa para establecer el interpolante global de diferenciación. La transformada de Fourier de una función periódica, en un dominio de $T = 2\pi$, con N nodos espaciados a una distancia $h = 2\pi/N$, y números de onda, k , que sean múltiplos enteros de $\pi/h = N/2$, se establece por medio de:

$$\hat{\kappa} = h \sum_{j=1}^N e^{ikx_j} \kappa_j \quad (4.18)$$

para toda $k = -N/2 + 1, \dots, N/2$; donde k es la variable en el espacio de Fourier o número de onda. Mientras que la transformada inversa de Fourier está definida por:

$$\kappa_j = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} e^{ikx_j} \hat{\kappa}_k \quad (4.19)$$

El cálculo de la transformada discreta de Fourier y su inversa se puede realizar por medio del algoritmo propuesto por Cooley y Tukey (1965) conocido como *Transformada Rápida de Fourier* (FFT, por sus siglas en inglés). Aquí, la aproximación de las derivadas que definen los modelos de rompimiento de gota se realiza a partir de la implementación de la FFT y su inversa (IFFT) a los valores del radio de interfase para cada paso de tiempo $\kappa(\tau, x^*)$, estableciendo así el método espectral de diferenciación espectral. El siguiente diagrama muestra el

procedimiento utilizado para realizar la diferenciación espectral con series de Fourier:

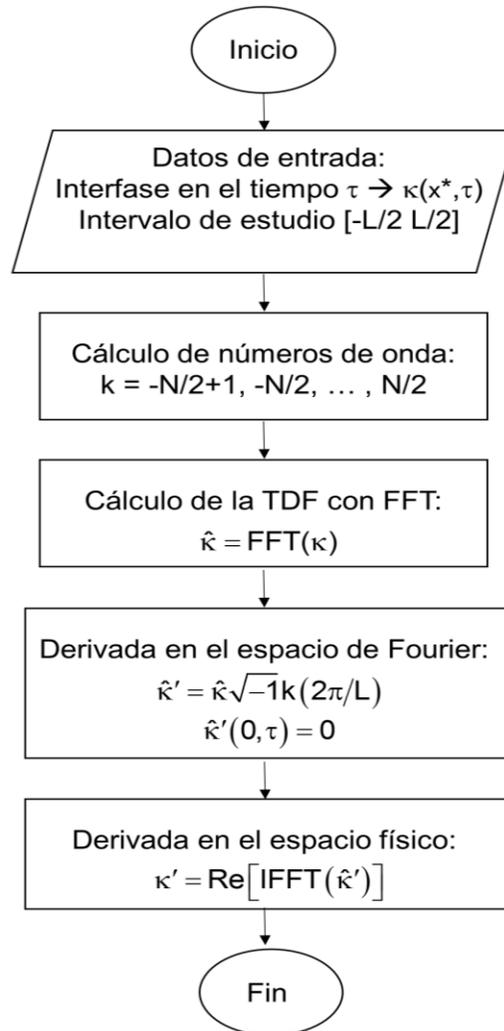


Figura 4.1 Diagrama de flujo para la obtención de la diferenciación espectral de Fourier de una función periódica de N puntos par y periódica, utilizando los algoritmos de FFT y IFFT (Cooley y Tukey, 1965).

4.2 Número capilar límite (Ca_{lim})

Los estudios teóricos acerca del rompimiento de gota tienen típicamente dos objetivos: 1) el desarrollo de modelos que describan la evolución de la interfase entre las fases mojanete y no mojanete hasta que ocurre el rompimiento de gota, si este ocurre, y 2) la definición de criterios de ruptura para establecer *a priori* la ocurrencia o inhibición del rompimiento de gota (Deng *et al.*, 2014).

En cuanto a este último tema de interés, cabe señalar que los enfoques actuales que establecen la ocurrencia del rompimiento de gota han sido formulados para condiciones cuasi-estáticas de flujo, en las que los mecanismos que gobiernan el flujo son controlados por la geometría del capilar. Sin embargo, algunos estudios sugieren que el rompimiento de gota no ocurre por arriba de un valor umbral del número capilar y dadas ciertas razones de viscosidad, aún cuando se cumplen los criterios estáticos de ruptura.

Peña *et al.* (2009) observan que durante el flujo a números capilares altos las fuerzas viscosas predominan sobre las superficiales. Debido a esto, la fuerza que conduce el flujo de la fase mojante hacia la constricción tiende a desaparecer y con ello inhibir el rompimiento de gota. Estos autores señalan que, en condiciones límite, es decir, $Ca \rightarrow \infty$, $\sigma / (Q / \pi R_T^2) \mu_2 \rightarrow 0$: *“debe existir un valor crítico finito del número capilar por encima del cual el esfuerzo cortante en la pared es más fuerte que el flujo conducido por capilaridad y no se observe el snap-off”*.

Con relación a lo anterior, Deng *et al.* (2015) realizan un estudio numérico en el que analizan la existencia de un límite superior del número capilar en el que se inhibe el rompimiento de gota, aun cuando se cumplen los criterios estáticos de ruptura. Aunque debe observarse que los autores limitan su análisis a una razón de viscosidades igual a la unidad.

4.2.1 Modelo empírico de Ca_{lim} por agrupación entorno a $\tilde{\alpha}$

Si se evalúa el modelo MDB, representado por (3.46), a partir del límite inferior del número capilar, $Ca = 3 \times 10^{-4}$, dados un valor de longitud L y razón de radios a , que cumplan con los criterios de ruptura estáticos, es de esperarse que ocurrirá el rompimiento de gota; pero cuando Ca aumenta, se encuentra un valor crítico de Ca donde la ruptura se inhibe. Este límite superior se denomina Ca_{lim} .

Los valores de Ca_{lim} para diversas combinaciones de longitudes adimensionales L razón de radios a y para una razón de viscosidades $k = \mu_1/\mu_2 = 1$, obtenidos por Deng *et al.* (2015) siguiendo un procedimiento similar al arriba expuesto, son mostrados en la Figura 4.2. En esta figura, para un valor específico de a , el valor del límite superior de Ca muestra un comportamiento singular en términos de umbral de ruptura, donde éste crece y después decrece conforme aumenta L . Este comportamiento puede interpretarse por la competencia entre el desequilibrio en la presión capilar y el tiempo de traslado de la fase mojante del poro hacia la garganta; ya que ambos se incrementan conforme crece L . Por ejemplo, el incremento de la diferencia de presiones tiene una dependencia cuadrática con L (Beresnev *et al.*, 2009; Ec. 5). Por otro lado, para un valor de L dado, conforme la razón de radios disminuye crece el desequilibrio en la presión capilar mientras que los tiempo de ruptura, y por lo tanto los de traslado, se reducen (Deng *et al.*, 2015; Fig. 4). En consecuencia para valores de a menores Ca_{lim} aumenta.

De acuerdo con el comportamiento de Ca_{lim} expuesto anteriormente, las condiciones críticas de Ca en qué se inhibe el rompimiento de gota, quedan definidas conforme varía o se fija alguna de las dos variables geométricas (longitud y razón de radios). Por lo que se buscó establecer una relación entre estas condiciones críticas de la dinámica del flujo y una forma integral de la geometría, en este caso el gradiente geométrico, $\tilde{\alpha}$.

El valor de $\tilde{\alpha}$ no es exclusivo de una única configuración geométrica, distintas combinaciones de a y L resultan en un mismo valor de $\tilde{\alpha}$. Por ejemplo, valores de $L = \{16, 15, 14, \dots, 10\}$ y su correspondiente $a = \{0.20, 0.25, 0.30, \dots, 0.50\}$, se agrupan en $\tilde{\alpha} = 0.10$. Para este estudio, se definieron grupos de configuraciones geométricas que cubrieran el rango de ambas variables geométricas de $2 \leq L \leq 16$ y $0.2 \leq a \leq 0.5$. Cada grupo es representado por un valor de $\tilde{\alpha}$. Para cada grupo de configuraciones geométricas fueron obtenidos los valores asociados de $Ca_{lim}^{\tilde{\alpha}}$ correspondientes, utilizando el modelo de la Ec. (3.46). Como se había previsto

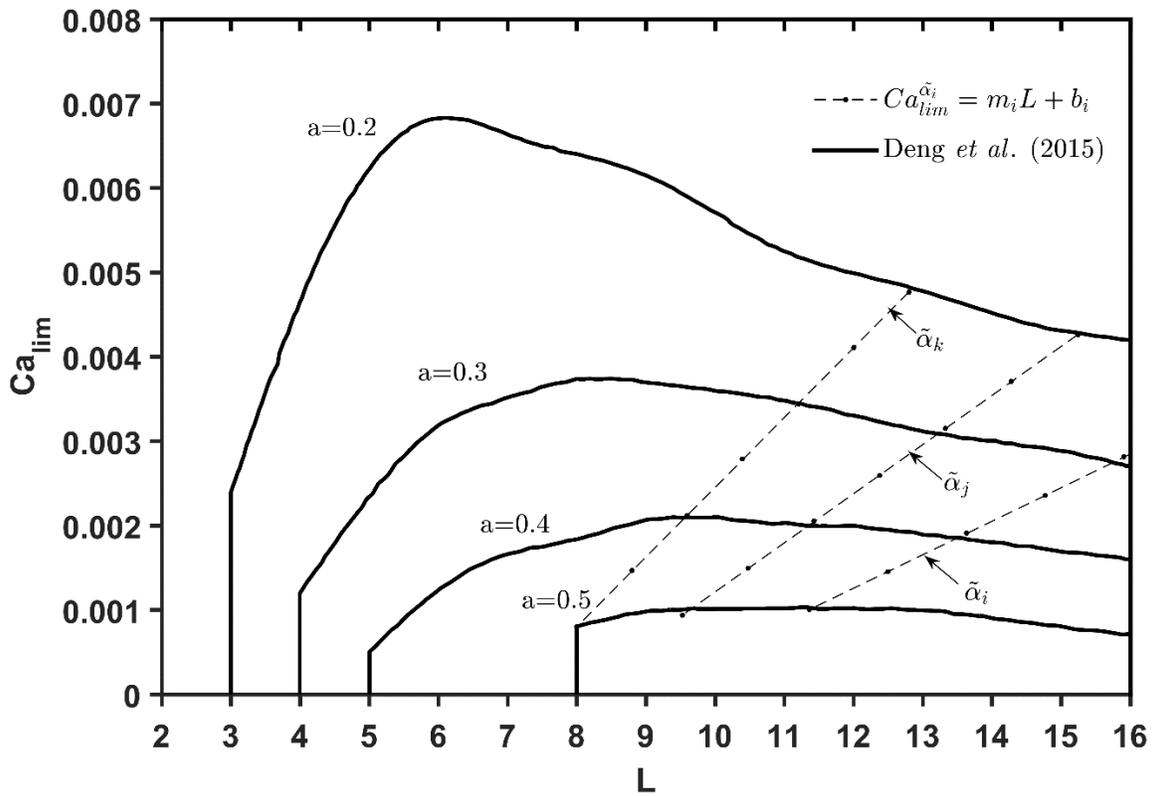


Figura 4.2 Gráfica de los valores del límite superior del número capilar en que se inhibe el rompimiento de gota (Ca_{lim}) dada una razón de radios, a , y longitud adimensional de poro, L ; para una razón de viscosidades de $k = 1.00$. Se muestran simultáneamente las rectas de ajuste que agrupan, con respecto a L , los valores de Ca_{lim} entorno a un mismo valor de gradiente geométrico, $\tilde{\alpha}$.

intuitivamente, estos valores de $Ca_{lim}^{\tilde{\alpha}}$ al ser agrupados por $\tilde{\alpha}$ guardan cierta relación con la geometría, de tal manera que se ajustan adecuadamente si se emplea $Ca_{lim}^{\tilde{\alpha}_i} = m_i L + b_i$; en donde m_i y b_i son parámetros del ajuste.

En la Figura 4.2, por ejemplo, se muestran las rectas de ajuste de $Ca_{lim}^{\tilde{\alpha}_i}$ para los grupos de configuraciones geométricas correspondientes a $\tilde{\alpha}_{i,j,k} = \{0.125, 0.105, 0.088\}$ en las que $m_{i,j,k} = 10^{-4} \{8.26, 5.81, 3.97\}$ y $b_{i,j,k} = -10^{-3} \{5.80, 4.60, 3.51\}$, las cuales coinciden con los valores de Ca_{lim} obtenidos por Deng et al. (2015). Por otro lado, los valores de los coeficientes que toman todo el conjunto de relaciones lineales del tipo $Ca_{lim}^{\tilde{\alpha}_i} = m_i L + b_i$, siguen una ley

en potencia con $\tilde{\alpha}_i$, de la forma: $m_i = d\tilde{\alpha}_i^e$ y $b_i = f\tilde{\alpha}_i^g$, donde los parámetros de ajuste son d , e , f y g . Con base en el comportamiento lineal expuesto y las relaciones empíricas, se propone una formulación para reproducir la familia de curvas de Ca_{lim} en función de la geometría del capilar:

$$Ca_{lim} = d\tilde{\alpha}^e L + f\tilde{\alpha}^g \quad (4.20)$$

Los parámetros con los que se obtiene el mejor ajuste para el modelo de la Ec. (4.20) se determinaron considerando el método conocido como *Differential Evolution* (Storn y Price, 1997); en el que se estableció la función objetivo como un problema de optimización de mínimos cuadrados:

$$\min E(\psi) = (1/2) \sum_{i=1}^M [Ca_{lim} - Ca_{lim}(\psi)]^2 \quad (4.21)$$

dada la correspondencia $\psi = \{x_1, x_2, x_3, x_4\} = \{c, d, e, f\}$.

La metodología descrita en este apartado se utiliza para extender el análisis del número capilar límite, Ca_{lim} , a otras razones de viscosidad diferentes a la unidad, con lo cual resulta un criterio de ruptura dinámico general que consideran también algunos aspectos de la reología del sistema bifásico, como lo es precisamente la razón de viscosidades. En el siguiente Capítulo, RESULTADOS Y DISCUSIÓN, se expone la evaluación del criterio de ruptura obtenido siguiendo la metodología presentada.

4.3 Resumen del Capítulo

En la primera sección de este Capítulo se explica el esquema de trabajo propuesto para resolver numéricamente los modelos de rompimiento de gota, independientemente del tipo de interfase con la que se trate. Este esquema está basado en la diferenciación pseudo-espectral con series discretas de Fourier (PEF) la cual utiliza los algoritmos de la transformada rápida de Fourier (FFT) y su inversa

(IFFT) para aproximar las derivadas de una función discreta (Figura 4.1). El método resulta adecuado sobre todo para dominios periódicos, como es el caso de la geometría supuesta para la pared del capilar. A manera de introducción a la diferenciación pseudo-espectral se hace un repaso de los conceptos principales del método de diferencias finitas. Complementario a esto, se exponen los esquemas numéricos de Euler Explícito (FE) y del Método de Líneas (ML), los cuales han sido utilizados por otros autores para resolver algunos casos de los modelos de rompimiento de gota.

En la segunda sección del Capítulo se trata sobre la metodología propuesta para establecer un modelo empírico que estime el número capilar límite (Ca_{lim}) en que se inhibe el rompimiento de gota, dadas cierta geometría y condiciones de flujo, el cual puede emplearse como criterio de ruptura para condiciones dinámicas de flujo. El modelo referido, se obtiene a partir del ajuste lineal de aquellos valores de Ca_{lim} obtenidos para diferentes combinaciones geométricas que se agrupan en un mismo valor de gradiente geométrico $\tilde{\alpha}$, y la longitud L correspondiente. Del conjunto de estas rectas de ajuste, se generan otras relaciones a modo de leyes de potencia, con sus respectivos parámetros de ajuste, con las que se constituye el modelo empírico del Ca_{lim} . Si bien esta metodología se define para una razón de viscosidades igual a la unidad, sirve para extender el análisis del Ca_{lim} a otras razones de viscosidad, tal como se expone en el siguiente Capítulo.

V. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este Capítulo se exponen los resultados obtenidos al aplicar la metodología numérica desarrollada en el Capítulo IV para resolver los modelos de rompimiento de gota y establecer criterios de ruptura. Al igual que en el capítulo anterior, el presente se divide en dos partes principales. En la primera parte se destacan los resultados obtenidos con el esquema de trabajo unificador propuesto, basado en la utilización del método pseudo-espectral con la transformada discreta de Fourier (PEF), con el cual son resueltos el conjunto de los modelos de rompimiento de gota. En la segunda parte de los resultados, se expone primero el comportamiento del número capilar límite para diferentes razones de viscosidad, así como la influencia de ésta en el tiempo de ruptura. Lo anterior es una extensión del análisis numérico actual reportado en la literatura. Seguido de esto, se presenta la evaluación de los criterios dinámicos de ruptura formulados a partir de la metodología desarrollada para los modelos empíricos de Ca_{lim} , pero aplicada a casos en los que la razón de viscosidades es diferente de la unidad. Al final de cada apartado se presenta la discusión de los resultados presentados.

5.1 Modelación del rompimiento de gota

Cada uno de los modelos de rompimiento de gota para los diferentes tipos de interfases a (GR para gas-líquido; HE en gas-líquido elásticas; BD cuando es líquido-líquido) han sido resueltos con una técnica numérica diferente; lo que puede ser una limitante al tratar, por ejemplo, de evaluar el efecto de diferentes fluidos en un mismo sistema de flujo.

En esta sección se presentan los resultados de la simulación con los modelos de rompimiento de gota obtenidos con el esquema pseudo-spectral basado en series de Fourier, así como su comparación con resultados reportados en la literatura, obtenidos con otras técnicas numéricas.

5.1.1 Rompimiento de gota en interfases gas- líquido

El modelo de rompimiento de gota para interfases gas-líquido propuesto por Gauglitz y Radke (1990), aquí llamado GR y representado por (3.20), fue resuelto por los autores mencionados por medio del método de Elemento Finito de Galerkin (EF-G). En la Figura 5.1 se muestra el resultado de evaluar el modelo GR con el método PEF para una razón de radios $a = 0.2$, pendiente de pared de poro de $\alpha = 0.1$. La condición inicial se define para $Ca = 8.94 \times 10^{-4}$.

Una variante importante del modelo GR es la que considera un capilar recto, es decir el caso en el que $\lambda = 1$. Recientemente Zhang *et al.* (2016) resuelven esta variante del modelo GR utilizando el *solver* de MATLAB® para EDP basado en el algoritmo de discretización espacial propuesto por Skeel y Berzins (1990). En la Figura 5.2 puede observarse los resultados de la modelación con el método PEF y su comparación con lo reportado en la literatura para un espesor inicial adimensional de $\varepsilon = 0.12$ y longitud de onda máxima de $\lambda_{\max} = 2^{3/2} \pi$.

5.1.2 Rompimiento de gota en interfases elásticas líquido-gas

En cuanto al modelo HE para interfases elásticas gas-líquido [Ec. (3.31)], Hoyer *et al.* (2016) optan por un método sencillo para su resolución, el de *Forward Euler* (FE). La comparación de los resultados reportados por los autores antes mencionados y los que se obtienen con el método numérico aquí propuesto (PEF), se enfocan primero en la evolución del radio de interfase en la parte central de la garganta del capilar ($x^* = 0$) para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$, $Ca = 0.1$ y valores del coeficiente adimensional de elasticidad, K , mayores y menores a la unidad, lo cual se muestra en la Figura 5.3 y en la Figura 5.4, respectivamente. Después, en la Figura 5.5, se muestran la evolución del perfil de la interfase para la misma geometría y $K^* = 0, 0.4, 0.8, 1.1$.

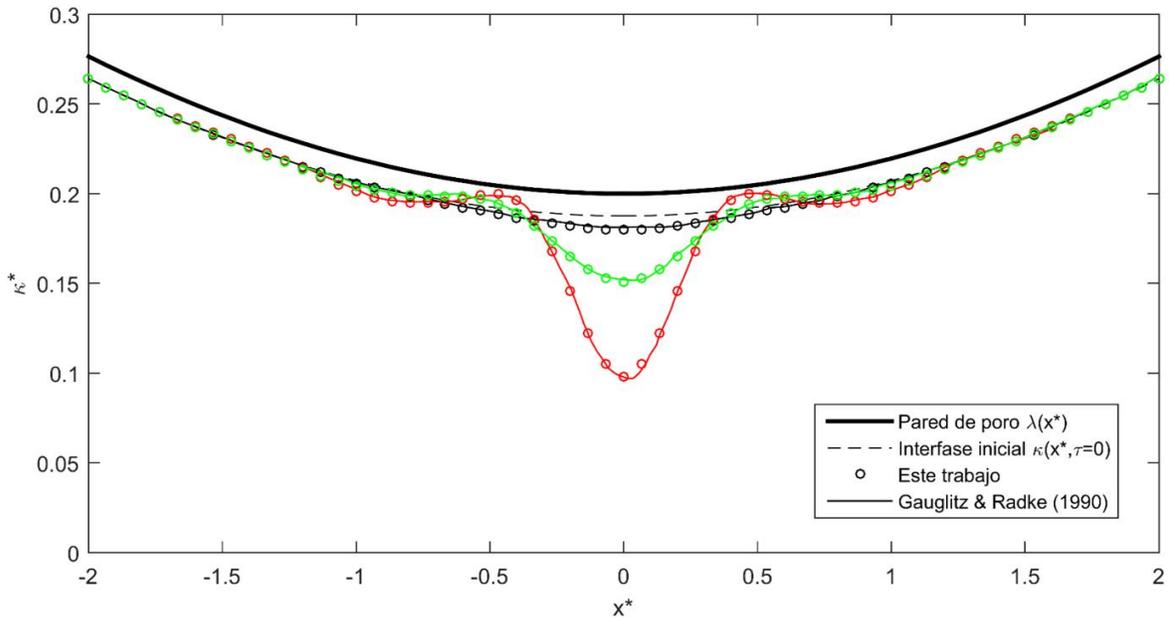


Figura 5.1 Perfiles de la evolución de la interfase gas-líquido obtenidos mediante la solución del modelo GR con el método PEF y su comparación con los reportados por Gauglitz y Radke (1990) con EF-G, para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$ y $Ca = 8.94 \times 10^{-4}$. Se muestran los resultados a diferentes tiempos adimensionales: $\tau = 1500$ — ; $\tau = 3000$ — ; $\tau = 5300$ — .

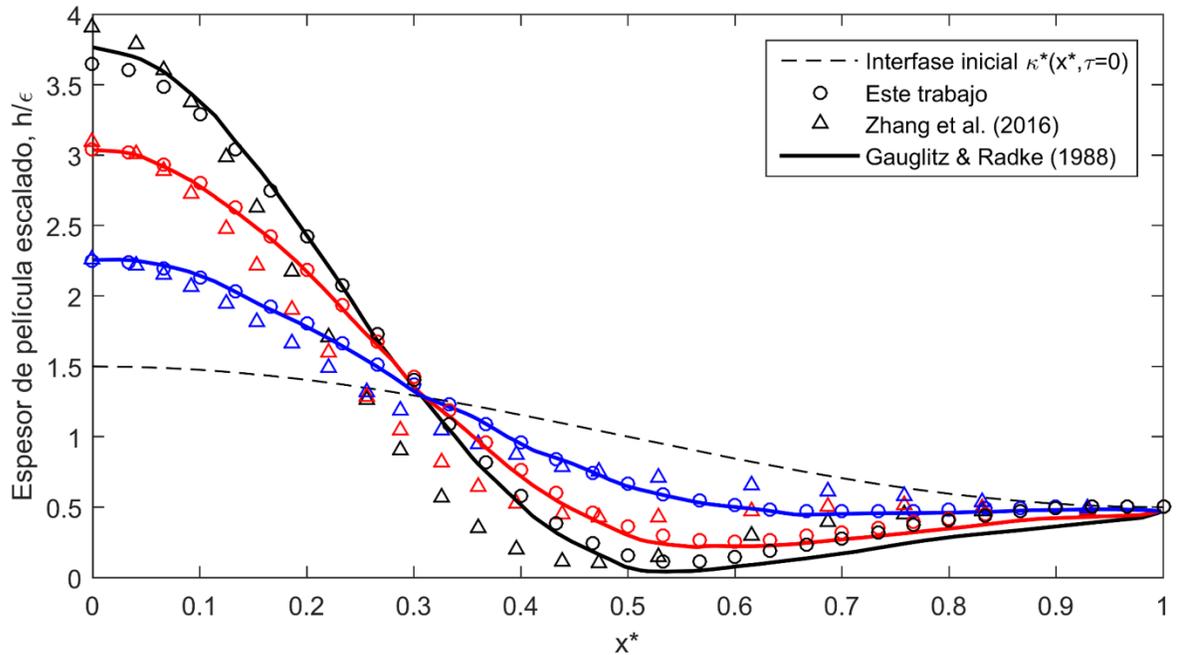


Figura 5.2 Perfiles de la evolución de la interfase gas-líquido obtenidos mediante la solución del modelo GR para capilares rectos, con el método PEF y su comparación con los reportados por Gauglitz y Radke (1990) con EF-G y Zhang *et al.* (2016) con MATLAB®, para $\varepsilon = 0.12$ y $\lambda_{\max} = 2^{3/2} \pi$. Se muestran los resultados en: $\tau = 885.4$ — ; $\tau = 2766.2$ — ; $\tau = 12870.4$ — .

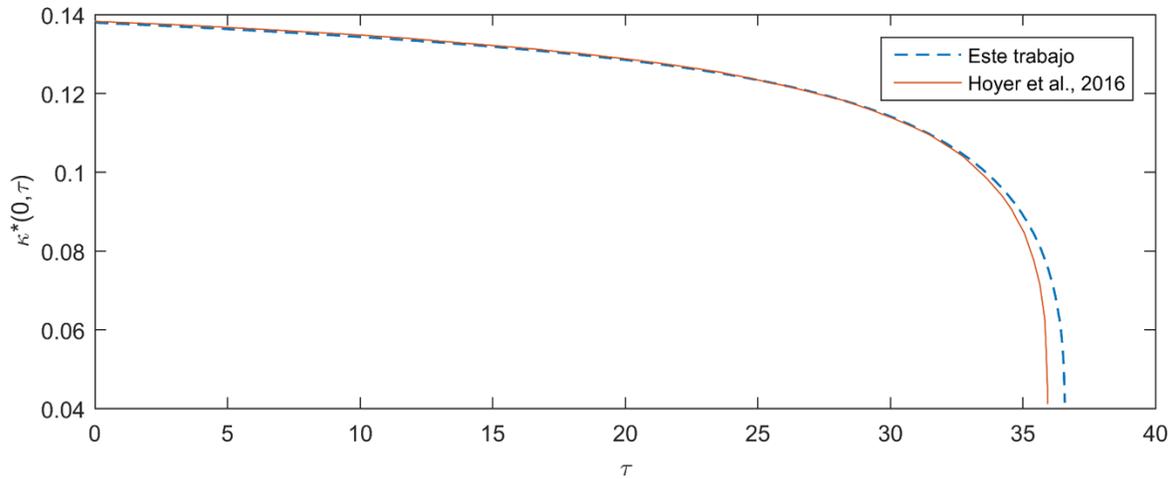


Figura 5.3 Evolución del radio de interfase κ al centro de la garganta del capilar ($x = 0$) con el modelo HE para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$, $Ca = 0.01$ y $K^* = 0.4$. Se comparan los resultados reportados por Hoyer *et al.* (2016) con el método FE (línea continua) y los obtenidos con el método PEF (línea punteada).

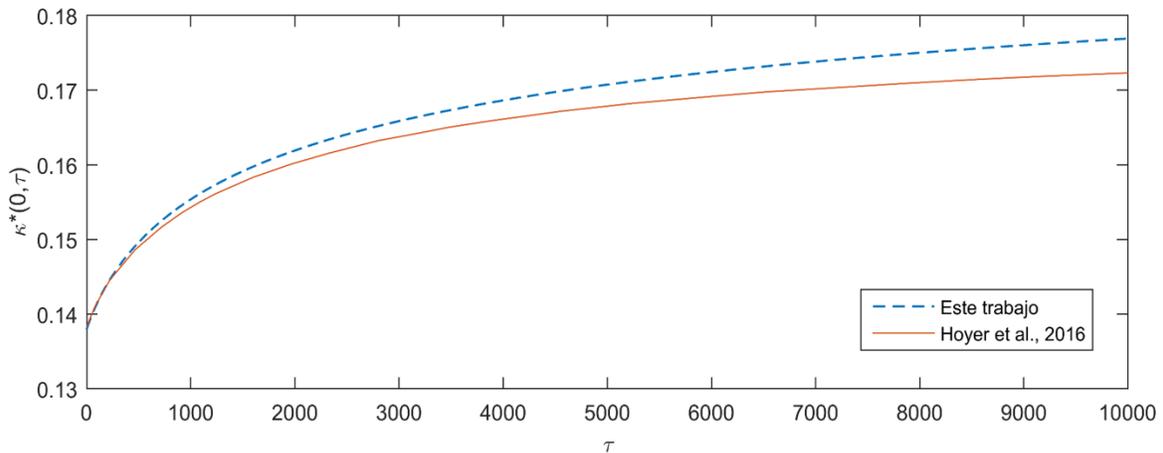


Figura 5.4 Evolución del radio de interfase κ al centro de la garganta del capilar ($x = 0$) con el modelo HE para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$, $Ca = 0.01$ y $K^* = 1.1$. Se comparan los resultados reportados por Hoyer *et al.* (2016) con el método FE (línea continua) y los obtenidos con el método PEF (línea punteada).

5.1.3 Rompimiento de gota en interfaces líquido-líquido

La solución del modelo BD para interfaces líquido-líquido es reportada por Beresnev y Deng (2010) utilizando el Método de Líneas (ML) implementado en MATHEMATICA®. Para la comparación de los resultados de este modelo, se toman dos casos de interés, en el primero se evalúa la sensibilidad al cambio de la pendiente de poro α , después se evalúa el efecto de la razón de viscosidades. Los anterior se muestra, en la Figura 5.6 y la Figura 5.7, respectivamente.

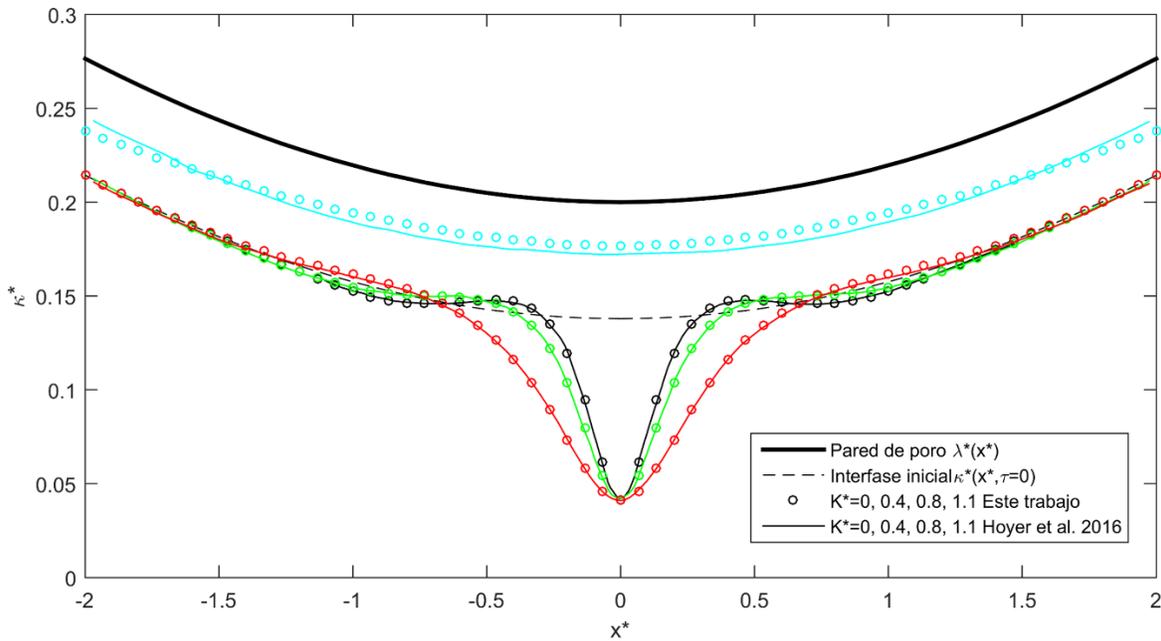


Figura 5.5 Perfiles de la evolución de la interfase elástica gas-líquido obtenidos mediante la solución del modelo HE con el método PEF y su comparación con los reportados por Hoyer *et al.* (2016) con el método FE, para $a = 0.2$, $\alpha = 0.1$ y $Ca = 0.01$. Se muestran los resultados para diferentes coeficientes de elasticidad: $K^* = 0$ — ; $K^* = 0.4$ — ; $K^* = 0.8$ — ; $K^* = 1.1$ — .

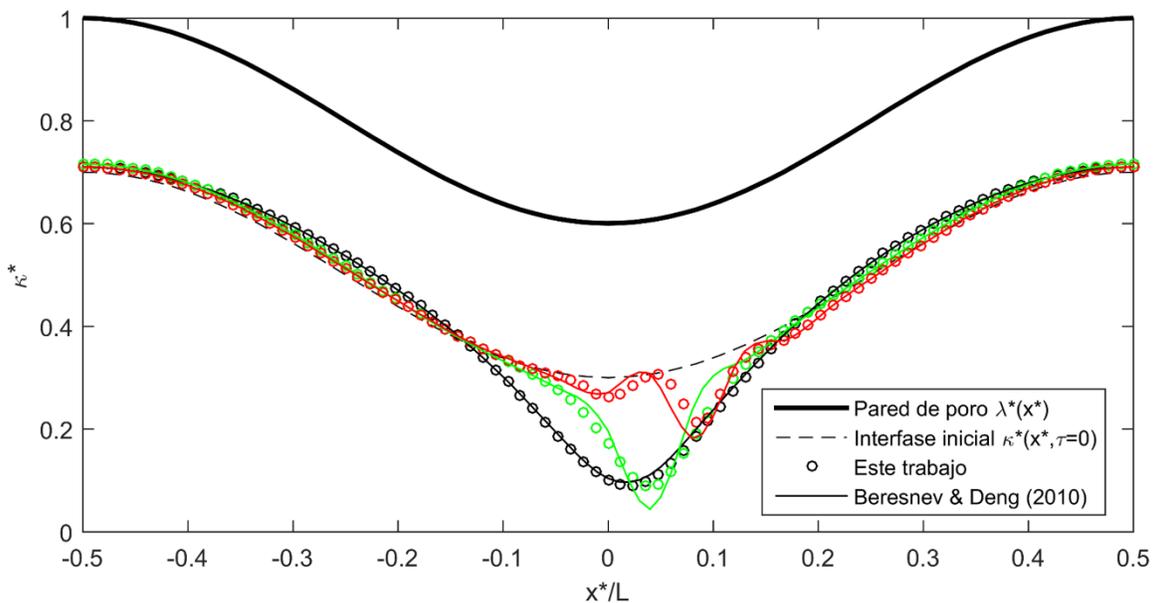


Figura 5.6 Comparación de los perfiles de la interfase momentos antes de la ruptura, obtenidos con el Método de Líneas (Beresnev y Deng, 2010) y el Método PEF para el modelo MDB. Los resultados corresponden a las simulaciones realizadas para $Ca = 10^{-3}$, $a = 0.6$, $\delta^* = 0.5R_g^*$, $\mu_1/\mu_2 = 10$ y las pendientes geométricas: $\alpha = 0.45$ — ; $\alpha = 0.225$ — ; $\alpha = 0.0695$ — .

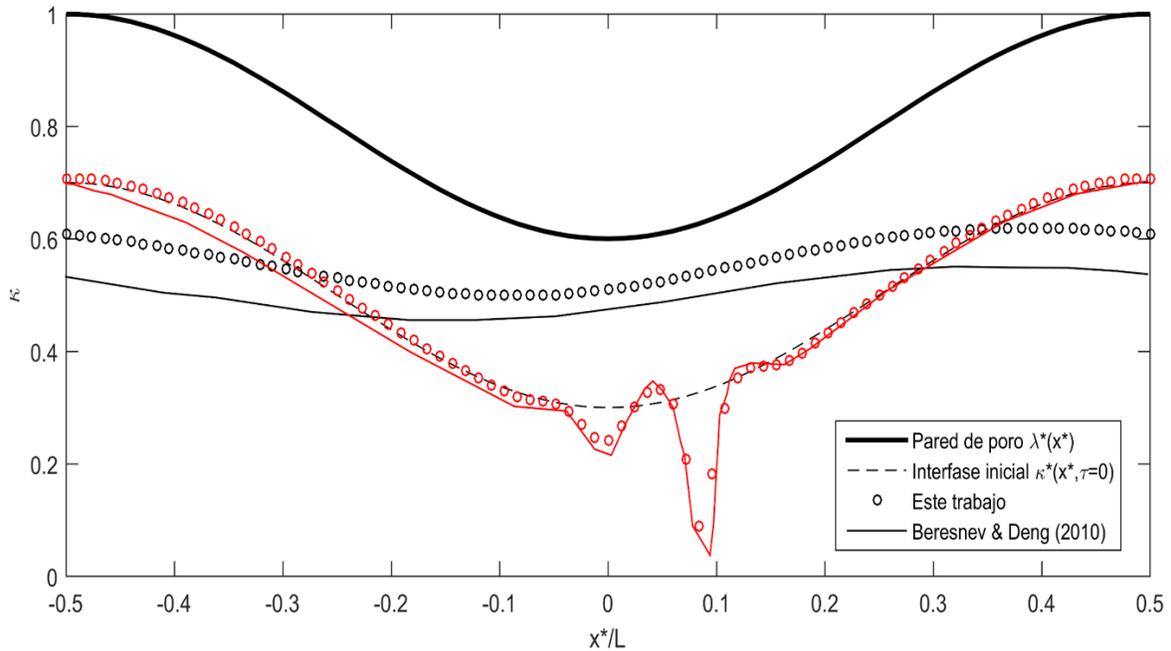


Figura 5.7 Comparación de los perfiles de la interfase obtenidos con el Método de Líneas (Beresnev y Deng, 2010) y el Método PEF para el modelo MDB. Los resultados corresponden a la simulaciones realizadas para los casos: $Ca = 10^{-3}$, $\alpha = 0.729$ y $\mu_1/\mu_2 = 10$ —; $Ca = 3 \times 10^{-5}$, $\alpha = 0.0695$ y $\mu_1/\mu_2 = 0.1$ —. En ambos casos $a = 0.6$ y $\delta^* = 0.5R_g^*$.

5.2 Efecto de la razón de viscosidades en el rompimiento de gota

Esta sección trata sobre la extensión del análisis numérico del número capilar límite para viscosidades arbitrarias de las fases. El análisis numérico actual desarrollado por Deng *et al.* (2015), cuyos principales resultados se resumen en la Figura 4.2, se limita a viscosidades iguales de las fases mojanete y no mojanete ($k = 1$). Sin embargo, como se ha observado en experimentos de microfluídica, la razón de viscosidades afecta la dinámica del flujo y en algunos casos puede inhibir el rompimiento de gota.

El análisis que aquí se presenta consiste en la evaluación del comportamiento del número capilar y del tiempo de ruptura para diferentes configuraciones geométricas y razones de viscosidad. El primer caso, referente al número capilar límite, se expone en el epígrafe 5.2.1; mientras que lo relacionado al tiempo de ruptura se ve en 5.2.2. Con los resultados de este análisis y utilizando

la metodología planteada en 4.2.1, se proponen una serie de formulaciones empíricas a manera de criterio dinámico de ruptura, lo cual se desarrolla en 5.2.3.

5.2.1 Efecto de la razón de viscosidades en Ca_{lim}

En el caso de viscosidades no nulas de las fases, el esfuerzo cortante en la interfase es quien resiste el flujo de la fase continua. Dicho esfuerzo tiende a incrementarse conforme aumenta la razón de viscosidades, por lo que el rompimiento de gota puede no ocurrir para ciertos valores de ésta.

Con el objetivo de conocer el efecto del ratio de viscosidades en el comportamiento del número capilar límite, Ca_{lim} , se realizaron una serie de simulaciones del modelo de rompimiento de gota para interfases líquido-líquido (modelo BD), en un rango de razón de viscosidades de $0.75 \leq k \leq 20$ y, al igual que en la Figura 4.2, para un rango de razón de radios de poro entre $0.2 \leq a \leq 0.5$ y longitudes adimensionales de $2 \leq L \leq 16$. Los principales resultados de estas simulaciones se explican a continuación.

La Figura 5.8 muestra el comportamiento de Ca_{lim} para $a = 0.20$ y diferentes valores de razón de viscosidades, k , mientras que en la Figura 5.9 se grafican las familias de éste para un valor fijo de k y un rango de radios adimensionales. Los resultados mostrados en la Figura 5.8 y la Figura 5.9 reflejan la tendencia general de Ca_{lim} para las variables de interés.

Un aspecto notable en la Figura 5.8 es que el incremento de los valores de Ca_{lim} a partir de la frontera vertical izquierda se vuelve más suave conforme el valor de k crece, con lo que el valor máximo de Ca_{lim} disminuye al aumentar k . En contraparte, el decremento a partir del punto máximo es más pronunciado al incrementarse k ; incluso, para valores moderados de éste, se originan fronteras derechas que indican el límite superior de L para la curva. En la serie de gráficas

de la Figura 5.9, resalta que el rango de a en que ocurre el rompimiento de gota para condiciones dinámicas se reduce con el incremento de k . Por ejemplo, para $k = 1.5$ y $a = 0.5$ no existen valores de Ca_{lim} a ninguna longitud; es decir que el rompimiento de gota, dada esta combinación de valores, puede ocurrir solo para condiciones estáticas.

Entonces, el principal aspecto a destacar respecto al efecto del ratio de viscosidades en Ca_{lim} , mostrado en la Figura 5.8 y la Figura 5.9, es que el incremento de k conlleva invariablemente a una reducción de los casos en los que ocurre el rompimiento de gota; ya sea en un rango menor de longitudes de poro L , razón de radios a , o del número capilar Ca .

5.2.2 Efecto de la razón de viscosidades en el tiempo de ruptura

Otro aspecto importante en la dinámica del rompimiento de gota es el tiempo en que ocurre este proceso. En esta sección se analiza cómo afecta la variación de la razón de viscosidades en el tiempo de ruptura (*snap-off time*) para algunas de las configuraciones geométricas y los rangos de Ca evaluados en la sección anterior.

Aquí, el tiempo de ruptura τ_s se define como el lapso de tiempo entre el inicio de la simulación, establecidas las condiciones iniciales, y el instante en que ocurre el rompimiento de gota, es decir el momento en que el radio de interfase alcanza un valor mínimo establecido cercano a cero.

Para este análisis, el modelo BD es evaluado, primero, para una geometría fija ($L = 10, a = 0.20$), igual viscosidad de las fases ($\mu_1 = \mu_2 \rightarrow k = 1$) y Ca se va modificando a pequeños incrementos desde su límite inferior ($Ca = 3 \times 10^{-4}$) hasta

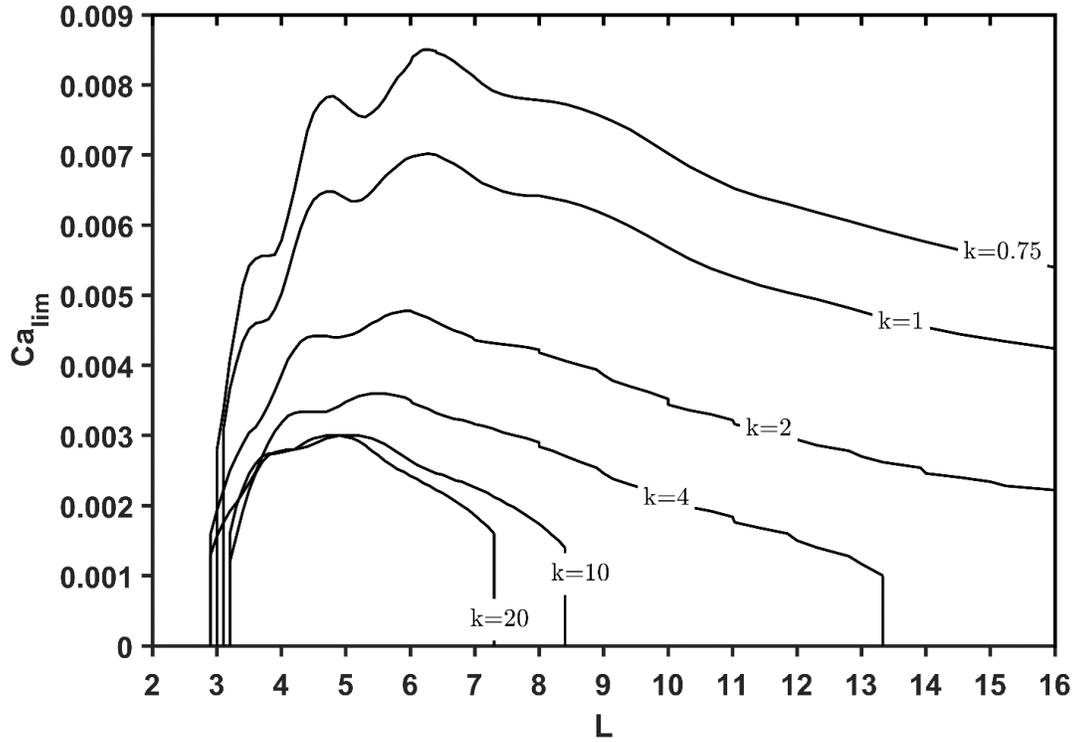


Figura 5.8 Valores de Ca_{lim} para $a = 0.2$ y diferentes valores de radio de viscosidad k .

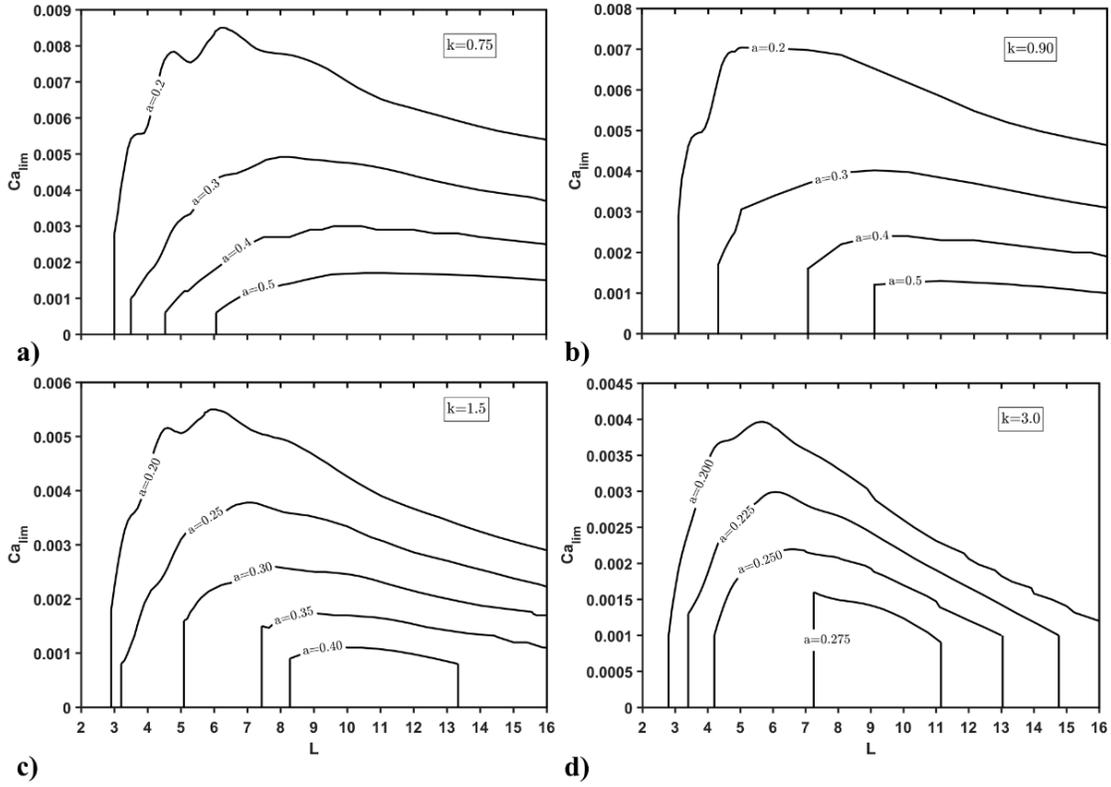


Figura 5.9 Familia de curvas de Ca_{lim} para diferentes radios de viscosidad.

que se alcanza el Ca_{lim} . El mismo procedimiento se repite para otras razones de viscosidad. En cada simulación τ_s es obtenido. Los resultados de la evaluación se ilustran en la Figura 5.10, la cual da muestra del efecto de la razón de viscosidades en el tiempo de ruptura en un rango de Ca dada una configuración geométrica. De forma similar, se obtuvieron las familias de curvas para diferentes radios de viscosidad k las cuales se muestran en la Figura 5.11. Para cada familia de curvas k y L se fijan y se evalúa el tiempo de ruptura en un rango de Ca y a .

En una primera inspección de las gráficas de la Figura 5.10 y Figura 5.11, destaca que el comportamiento del tiempo de ruptura difiere significativamente de la tendencia lineal que se presenta en los modelos numéricos de interfases gas-líquido (Gauglitz y Radke, 1990; Fig. 11). El comportamiento general de las curvas del tiempo de ruptura obtenido en las figuras antes mencionadas para interfases líquido-líquido, se puede caracterizar en los siguientes términos: el valor máximo de τ_s corresponde al valor mínimo de Ca ; después este valor va disminuyendo gradualmente conforme Ca aumenta, pero esta tendencia es interrumpida por un repentino incremento de τ_s . Posterior a esto, τ_s continua decreciendo en otro rango de Ca hasta que se presenta un nuevo incremento. Este comportamiento se repite hasta que se alcanza el Ca_{lim} . Tal como lo reporta Deng *et al.* (2015) (p. 6, Fig. 5), el incremento repentino de τ_s se debe a un cambio en la posición en que ocurre el rompimiento de gota.

El efecto más destacable del radio de viscosidades en el tiempo de ruptura se aprecia mejor en la Figura 5.10. En esta figura, puede observarse que el incremento en el radio de viscosidades tiende a comprimir las curvas de τ_s . Estas curvas mantienen su comportamiento general al aumentar k , pero con éste disminuye el valor de Ca_{lim} . Es decir, el incremento en el radio de viscosidades causa que el cambio de posición en el rompimiento de gota ocurra en intervalos de

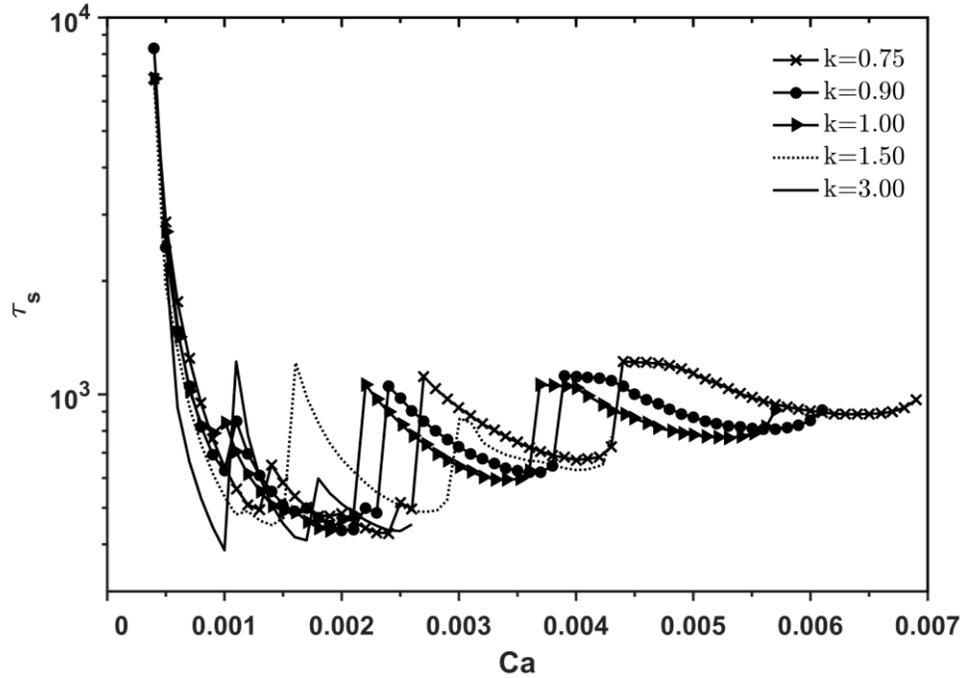


Figura 5.10 Curvas del tiempo de ruptura τ_s para diferentes valores de k en un rango de Ca . Los resultados corresponden a una geometría de $L = 10$ y $a = 0.20$.

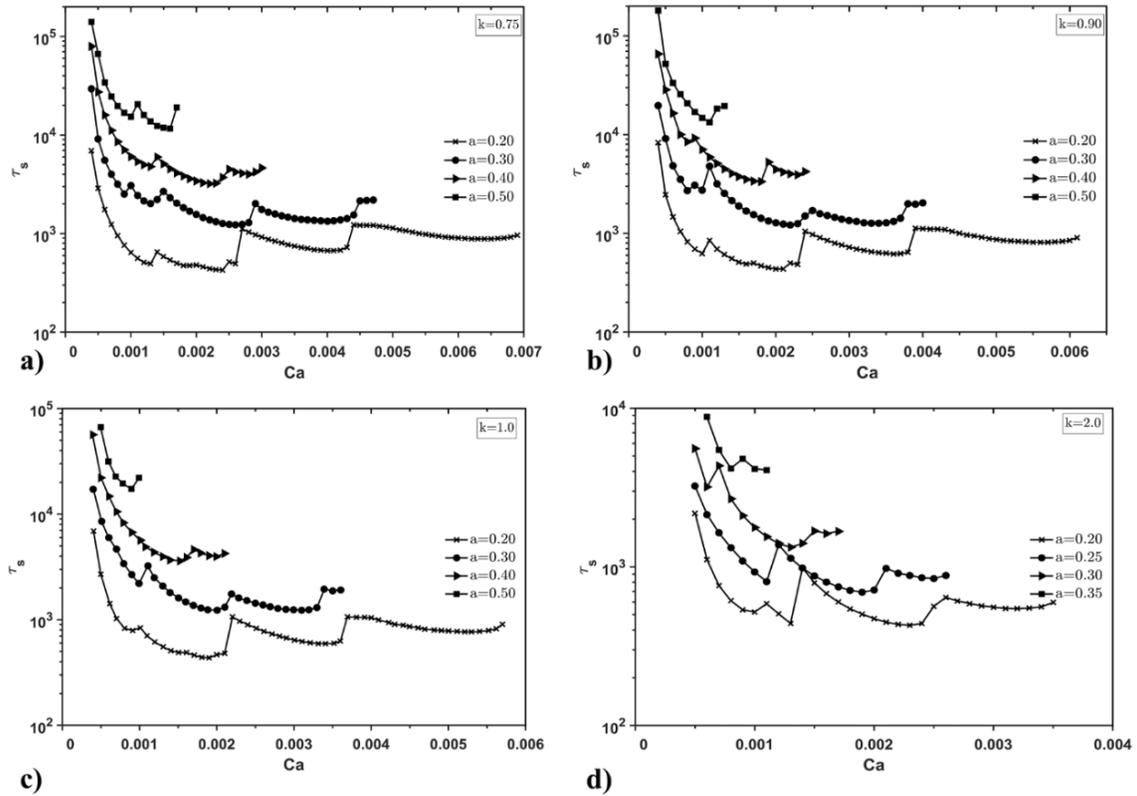


Figura 5.11 Familia de curvas de τ_s para $L = 10$ y diferentes valores de k **a)** $k = 0.75$ **b)** $k = 0.90$ **c)** $k = 1.0$ **d)** $k = 2.0$.

Ca cada vez menores; entonces los segmentos de las curvas de τ_s , delimitados por los incrementos repentinos, tienden a acortarse.

Nótese, también, que en las curvas de la Figura 5.10 para un mismo Ca el valor de τ_s puede aumentar o disminuir conforme lo hace el radio de viscosidades, sin que se destaque tendencia alguna; lo cual origina que en algunos puntos las curvas se crucen. En las familias de curvas de τ_s mostradas en la Figura 5.11 se distinguen dos comportamientos con respecto al incremento de la razón de radios, a: 1) el aumento del tiempo de ruptura, lo que es reflejo de la dependencia del tiempo de traslado de la fase mojante a la constricción con la geometría 2) El rango de valores de Ca decrece en cada curva, lo cual es consistente con el comportamiento de Ca_{lim} mostrado en la Figura 5.8 y la Figura 5.9, y discutido en la sección anterior.

Hasta aquí la extensión del análisis sobre el efecto de la razón de viscosidades en la dinámica del rompimiento de gota. Los resultados de este análisis sirven para formular un criterio de rompimiento de gota para condiciones dinámicas de flujo, tal como se plantea a continuación.

5.2.3 Criterio de ruptura para condiciones dinámicas de flujo

Como se vio en los dos apartados anteriores, la ocurrencia del rompimiento de gota está determinada no sólo por la geometría del capilar, sino que los factores dinámicos del flujo y la reología del sistema influyen en este proceso. Por lo que resulta pertinente disponer de un criterio de ruptura que tome en cuenta de forma conjunta los parámetros que describen adecuadamente la geometría del capilar (pendiente geométrica, longitud de onda, razón de radios), los factores dinámicos del flujo (número capilar) y algunos aspectos de la reología del sistema bifásico (razón de viscosidades). En este sentido, se aplica el modelo empírico de Ca_{lim} [Ec.

(4.20)] a las familias de curvas de Ca_{lim} para diferentes razones de viscosidades, con el objetivo de establecer un criterio dinámico de ruptura.

Para empezar, el modelo empírico se aplica para una razón de viscosidades de $k = \mu_1/\mu_2 = 1$. Los resultados se muestran de forma gráfica en la Figura 5.12, donde se hace una comparación de los valores de Ca_{lim} obtenidos por Deng *et al.* (2015) mediante la solución numérica del modelo BD [Ec. (3.46)], y los obtenidos con (4.20) dada la optimización de parámetros planteada en la función objetivo (4.21). Como puede observarse en esta última figura, el modelo empírico con los parámetros adecuados resulta favorable para la reproducción de la familia de curvas de Ca_{lim} . Entonces, se decide utilizar el modelo para extender el procedimiento a otras razones de viscosidad. En la Tabla 5.1 (segunda y tercera columna) se da cuenta de los parámetros de ajuste del modelo de Ca_{lim} y el valor que adquiere la función error con éstos, para cada una de las razones de viscosidades enlistadas.

El análisis continua con la inspección del conjunto de parámetros de la Tabla 5.1, en la que se detectaron tendencias bien definidas entre éstos y la razón de viscosidades, por ejemplo del tipo logarítmico; lo que permitió establecer un modelo general de pocos parámetros de Ca_{lim} , en términos de la geometría del capilar y la razón de viscosidades, de la forma:

$$Ca_{lim}^k = \beta \tilde{\alpha}^2 \left[\tilde{\alpha}^\eta L - C \tilde{\alpha}^{\eta+D} \right] \quad (5.1)$$

donde $\beta = Ak + B$ y $\eta = \ln(k^{0.5})$ y los parámetros de ajuste son $\Psi = \{A, B, C, D\}$.

Después de aplicar el algoritmo de optimización al modelo de (5.1), los parámetros toman los siguientes valores: $\Psi = \{0.0039, 0.0586, 1.8945, -0.6667\}$. Los resultados de la función error $E1(\Psi)$, análoga a (4.21) pero tomando en cuenta (5.1) se encuentran en la última columna de la Tabla 5.1. En la Figura 5.13 se muestran

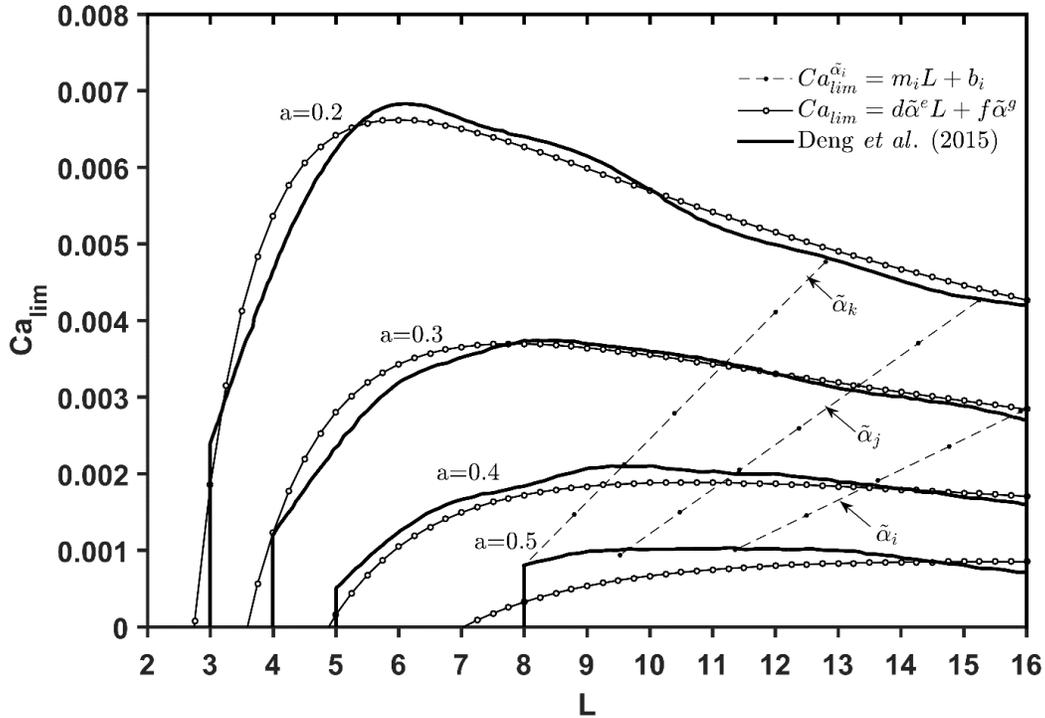


Figura 5.12 Gráfica de los valores del límite superior del número capilar en que se inhibe el rompimiento de gota (Ca_{lim}) dada una razón de radios, a , y longitud de poro, L ; para una razón de viscosidades de $k=1.00$. Se muestran simultáneamente los resultados obtenidos en la serie de simulaciones realizadas por Deng et al. (2015) y los del ajuste de la Ec. (4.21).

Tabla 5.1 Coeficientes de ajuste y valores de la función error para los modelos de Ca_{lim}^a .

k_i	$\psi_i = \{c_i, d_i, e_i, f_i\}$	Ψ	$E(\psi_i)^{**}$	$E1(\Psi)$
0.75	0.0698, 1.9781, 0.1349, 1.3443	0.0039, 0.0586, 1.8945, -0.6667	2.13 E-5	3.94 E-5
0.90	0.0661, 1.9928, 0.1244, 1.3233		7.91 E-6	9.50 E-6
1.00	0.0793, 2.1209, 0.1518, 1.4593		8.93 E-6	1.41 E-5
1.50	0.0888, 2.2411, 0.1620, 1.5001		3.80 E-6	1.18 E-5
2.00	0.1091, 2.4070, 0.1974, 1.6383		2.48 E-6	1.26 E-5
2.50	0.1294, 2.5263, 0.2302, 1.7269		3.31 E-6	1.25 E-5
3.00	0.1408, 2.5991, 0.2483, 1.7836		3.41 E-6	1.51 E-5
3.50	0.1381, 2.6149, 0.2412, 1.7869		3.77 E-6	1.55 E-5
4.00	0.1358, 2.6376, 0.2364, 1.8055		3.91 E-6	1.23 E-5
4.50	0.1116, 2.6195, 0.1961, 1.8071		3.95 E-6	8.33 E-6
10.0	0.3492, 3.1809, 0.5983, 2.2977		3.52 E-7	4.39 E-6
20.0	0.3424, 3.4302, 0.6009, 2.5870		2.91 E-7	3.87 E-6

** Léase 2.13 E-5 como 2.13×10^{-5} .

simultáneamente las familias de curvas de Ca_{lim} obtenidas con los modelos: BD Ec. (3.46); Ca_{lim} de parámetros variables, Ec. (4.20); y Ca_{lim} general de parámetros fijos, Ec. (5.1). En esta figura se incluye también un diagrama del capilar con las principales variables en su forma adimensional, en donde se esquematiza la interfase a instantes de ocurrir el rompimiento de gota, lo cual no ocurre en los casos en que se excede Ca_{lim} , sino que la interfase alcanza un estado de equilibrio cercano a la condición inicial.

Como puede verse en los resultados de la Figura 5.13 y la Tabla 5.1, los modelos de las ecuaciones (4.20) y (5.1) reproducen adecuadamente el comportamiento de Ca_{lim} en el rango de las variables físicas estudiado, y pueden servir como criterio de ruptura si se establece que:

$$Ca < Ca_{lim}(a, L, \psi_i) \quad (5.2)$$

si se considera (4.20) y el conjunto de parámetros variables; o

$$Ca < Ca_{lim}(a, L, k, \Psi) \quad (5.3)$$

al ser utilizado el modelo general (5.1) de parámetros fijos.

Es decir, dada una configuración geométrica, definida por a y L , establecido un régimen de flujo Ca y conocida la razón de viscosidades k , se evalúan los modelos empíricos de rompimiento de gota para estos parámetros, con lo que se obtiene el Ca_{lim} correspondiente. Entonces, para esas condiciones de flujo, la ruptura ocurrirá siempre que se cumpla, por ejemplo, el criterio de ruptura de la desigualdad planteada en (5.3); o bien, para todos los valores de Ca menores al Ca_{lim} obtenido.

Al examinar los resultados de la Figura 5.13 y la Tabla 5.1, se observa que la mejor aproximación de los valores de Ca_{lim} , obtenidos con el modelo MDB, es la

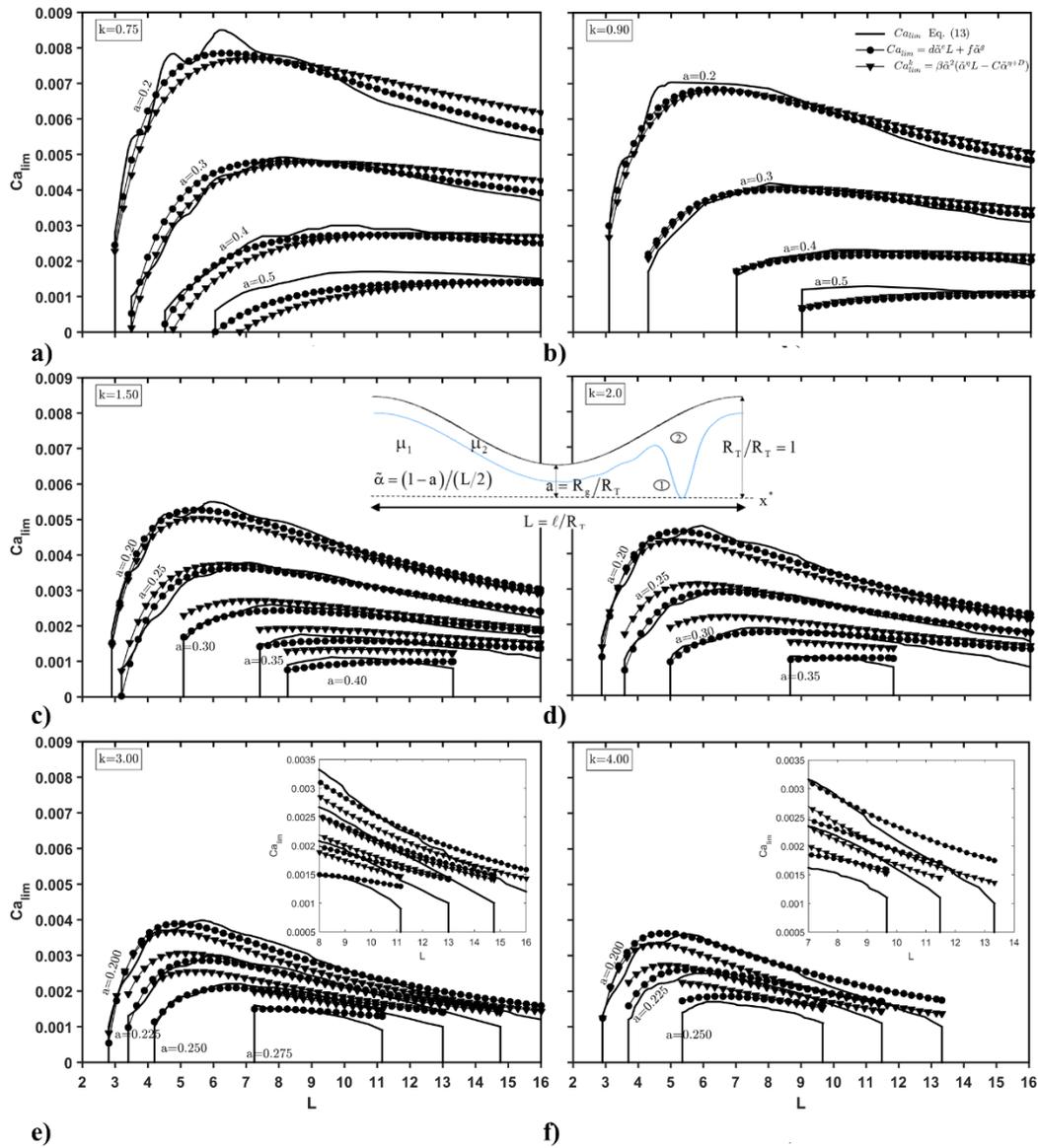


Figura 5.13 Familia de curvas de Ca_{lim} obtenidas con diferentes modelos: 1) BD (Beresnev y Deng, 2010) — 2) Empírico de parámetros variables $Ca_{lim} = d\tilde{\alpha}^e L + f\tilde{\alpha}^g$ —●— 3) Empírico de parámetros fijos $Ca_{lim}^k = \beta\tilde{\alpha}^2 [\tilde{\alpha}^\eta L - C\tilde{\alpha}^{\eta+D}]$ —▼— .

que resulta de la aplicación del modelo de parámetros variables, en tanto que los resultados del modelo de parámetros fijos son también aceptables, pero implican un error mayor de la función objetivo. Al comparar el error global entre uno y otro planteamiento, se tiene en el peor de los casos un aumento de un orden de magnitud.

Cabe señalar que, aunque el ajuste matemático aplicado para estimar los valores de Ca_{lim} , como función de la geometría del capilar y la razón de viscosidades, es empírico, debe resaltarse que la física del fenómeno estudiado está presente en las gráficas de Ca_{lim} . Los modelos representados en la Figura 5.13, como se expone en los siguientes párrafos, expresan el comportamiento del rompimiento de gota en el que están involucradas las tres fuerzas competitivas que regulan este mecanismo: 1) la diferencia en la presión capilar que conduce la fase mojante hacia la constricción, 2) la resistencia al flujo de la fase mojante y 3) el proceso de estrangulamiento (*squeezing*) de la fase no mojante. Estas fuerzas se modifican conforme varían: la geometría del capilar, $\tilde{\alpha} = (R_T - R_g)/(\ell/2)$; el radio de viscosidades, $k = \mu_1/\mu_2$; y el número capilar $Ca = (Q/\pi R_T^2)\mu_2/\sigma$.

En cuanto a la diferencia de presión capilar en la cresta y en la constricción del capilar, que se presenta al inicio del proceso de rompimiento de gota, es sabido que ésta depende de la diferencia de la curvatura en los puntos de interés del perfil de la interfase. Y ya que se estableció una condición inicial paralela a la pared de poro y acoplada con el número capilar local Ca , se acentúa la relación entre éste y la geometría. De hecho, el criterio de ruptura cuasi-estático de Beresnev *et al.* (2009) parte de la condición $P_c^{garganta} > P_c^{constricción}$ para que ocurra el rompimiento de gota. Después de una serie de operaciones algebraicas, esta condición puede escribirse en términos de la geometría y el número capilar local como:

$$L > 2\pi\sqrt{(1-\delta^*)(a-\delta^*)} \quad (5.4)$$

donde $\delta^* = 0.0412\log_{10}(Ca) + 0.1473$

Este criterio se cumple en todos los casos evaluados aquí, incluso para el límite superior de Ca ($Ca = 1 \times 10^{-2}$). Sin embargo, para condiciones dinámicas de flujo el flujo por diferencia de presión capilar no es la única fuerza que interviene en

la ruptura, por lo que el criterio deja de ser válido. Aunque, como se muestra en la Figura 4.2, el gradiente geométrico, $\tilde{\alpha}$, tiene influencia en el comportamiento de Ca_{lim} ; por ejemplo, para el mismo valor de $\tilde{\alpha}$ Ca_{lim} crece linealmente conforme aumenta la longitud y disminuye la razón de radios.

Por otro lado, si se considera fija la viscosidad de la fase mojante (μ_2), el incremento del radio de viscosidades, $k = \mu_1/\mu_2$, se dará conforme aumente la viscosidad de la otra fase. Entonces, conforme k aumenta el flujo de la fase mojante hacia la constricción se ve afectado debido al incremento del esfuerzo cortante en la interfase y que el proceso de estrangulamiento se ve debilitado. Estas condiciones se intensifican para flujos números capilares altos, donde las fuerzas viscosas predominan sobre las superficiales. Debido a lo anterior, resulta lógico pensar que el aumento de la razón de viscosidades inhiba el crecimiento de la fase mojante en la constricción en números capilares altos. Esto puede ser verificado si se comparan, por ejemplo, las gráficas **a)** $k = 0.75$ y **f)** $k = 3.0$ de la Figura 5.13. En esta última gráfica se ha incrementado cuatro veces la relación de viscosidades en relación con la primera, y resulta evidente que el rango de valores en que ocurre el rompimiento de gota ha disminuido.

5.3 Resumen del Capítulo

La primera sección del Capítulo que nos ocupa se aboca en mostrar la bondad del método numérico de diferenciación pseudo-espectral con series de Fourier (PEF) como esquema unificador para resolver el conjunto de los modelos de rompimiento de gota: modelos GR, HE y BD, para interfases líquido-gas, líquidos-gas elásticas y líquido-líquido, respectivamente. En este sentido, se utiliza el esquema PEF para resolver algunos casos de los modelos de rompimiento de gota reportados en la literatura, y de esta forma comparar los resultados obtenidos por otros autores, empelando otras técnicas numéricas, con los que resultan del esquema de trabajo aquí propuesto. Lo anterior se plasma gráficamente en la serie de figuras que va de la Figura 5.1 y hasta la Figura 5.7; en éstas puede apreciarse

una coincidencia aceptable en la forma que adquiere la interfase, con los diferentes esquemas numéricos. De esta forma se valida el esquema numérico propuesto, el cual tiene la ventaja de poder ser aplicado al conjunto de modelos de rompimiento de gota y así poder evaluar sin dificultades adicionales la respuesta de un mismo sistema para diferentes interfases.

Lo concerniente al efecto de la reología, en específico la razón de viscosidades, en la dinámica del rompimiento de gota se expone en la segunda sección de este Capítulo; el cual cabe mencionar ha sido poco explorado en la literatura. Entonces, primero, se extiende el análisis actual del número capilar límite (Ca_{lim}) y del comportamiento del tiempo de ruptura para otras razones de viscosidad distintas de la unidad (Figura 5.8 a Figura 5.11). De este análisis se obtienen comportamientos bien definidos de Ca_{lim} por el efecto de la razón de viscosidades ($k = \mu_1/\mu_2$); por ejemplo la reducción de los rangos de longitud, razón de radios y del número capilar, en que ocurre el rompimiento de gota al aumentar k . Lo anterior permite extender la metodología diseñada para la obtención de un modelo empírico de Ca_{lim} a un modelo general que tome en cuenta, en forma conjunta, la razón de viscosidades, la geometría del capilar y el número capilar. La aplicación de este modelo puede verse en la Figura 5.12 y Figura 5.13, en las que se comparan las familias de curvas obtenidas con el modelo BD [Ec. (3.46)] y las de los modelos empírico de Ca_{lim} [Ec. (4.20) y Ec. (5.1)]. Además, con base en estos modelos empíricos, se proponen criterios de ruptura que son aplicables para diferentes condiciones reológicas y dinámicas de flujo [Ec. (5.2) y Ec. (5.3)].

VI. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

El estudio de emulsiones en el sector petrolero es un tema de interés actual. En esta investigación se trata el problema de la formación de emulsiones en el medio poroso por medio del mecanismo de rompimiento de gota. Dicho mecanismo ocurre durante el flujo bifásico en capilares con constricción, cuando el fluido mojanete es desplazado por otro fluido, lo que hace que la fase desplazada deje una película delgada en la pared, la cual puede aumentar su espesor y romper la continuidad de la otra fase.

El proceso de rompimiento de gota se aborda aquí, principalmente, desde un enfoque teórico a través de modelos matemáticos basados en las ecuaciones que gobiernan el flujo bifásico inmiscible a escala de poro. La formulación de estos modelos parte de la ecuación de conservación de la masa y utiliza el enfoque pendiente pequeña para aproximar la curvatura de la interfase en la ecuación de Young-Laplace. De acuerdo con la naturaleza de las fases, se trabaja con tres tipos de modelos: 1) GR para interfases gas-líquido 2) HE para el caso de gas-líquido elásticas y 3) BD para sistemas líquido-líquido. En el primer y segundo caso la viscosidad de la fase no mojanete se supone despreciable (al ser gas) lo que permite establecer expresiones explícitas de la presión capilar. Esto no ocurre en el caso de interfases líquido-líquido, por lo que la formulación del modelo resulta más compleja. La geometría del capilar se supone de forma sinusoidal y periódica.

Los modelos de rompimiento de gota empleados (GR, HE y BD), consisten en ecuaciones diferenciales parciales no lineales de cuarto orden; las cuales, según lo reportado en la literatura, han sido resueltas por diversas técnicas numéricas. Lo anterior representa una de las mayores dificultades detectadas para el análisis del rompimiento de gota, ya que los esquemas numéricos con los que se plantea la solución para unos no son siempre aplicables en los otros. Además, tal situación impide evaluar fácilmente, por ejemplo, la respuesta de un sistema al variar una de sus fases.

Para solventar dicha dificultad, se propone la utilización del método pseudo-espectral basado en la transformada discreta de Fourier, aprovechando los algoritmos de la transformada rápida y su inversa. Este método resulta adecuado para resolver el conjunto de modelos de rompimiento de gota ya que fue desarrollado para dominios y condiciones de frontera periódicas. La validación de este esquema numérico se hace mediante la comparación gráfica de los resultados obtenidos con el método arriba mencionado y los reportados en la literatura utilizando otras técnicas numéricas. En todos los casos hubo concordancia aceptable entre ambos. De esta forma, se establece un esquema numérico válido, que es aplicable a cualquiera de los modelos estudiados, cumpliendo así con uno de los principales objetivos de la investigación.

Establecida la solución numérica de los modelos matemáticos de rompimiento de gota, se procede a analizar las condiciones límite en que se inhibe el rompimiento de gota. Se parte de la hipótesis de que el rompimiento de gota en emulsiones durante el flujo a través de capilares con constricción depende de la interacción de tres fuerzas competitivas: 1) la diferencia en la presión capilar que conduce la fase mojanante hacia la constricción 2) la resistencia al flujo de la fase mojanante y 3) el proceso de estrangulamiento (*squeezing*) de la fase no mojanante. A su vez, estas fuerzas están determinadas por las principales variables físicas involucradas, es decir, la geometría del capilar, los factores dinámicos del flujo y la reología de los fluidos.

La tarea consiste en evaluar, a través de los modelos expuestos, la influencia de estas variables en la dinámica del rompimiento de gota y establecer un criterio de ruptura para condiciones dinámicas de flujo que permita estimar *a priori* si ésta ocurre o no. Para esto, se analiza el caso de un sistema con interfase líquido-líquido, en el que a diferencias de los otros (que involucran gas), la viscosidad no es despreciable e influye en el equilibrio de fuerzas que determinan las condiciones límite en que se inhibe el rompimiento de gota. Se cuenta con un antecedente, reportado por Deng *et al.* (2015), en el que se analiza, a través de simulaciones del

modelo BD, la influencia del número capilar y la geometría en la inhibición del rompimiento de gota; aunque –valga repetirlo- no se explora el efecto de la razón de viscosidades de las fases en éste. En su análisis, Deng *et al.* (2015) mapean en gráficas el límite superior del número capilar (Ca_{lim}) en que se inhibe el rompimiento de gota dada una geometría (longitud y razón de radios del capilar). Al estudiar el comportamiento de las gráficas de Ca_{lim} mencionadas, se detecta que la geometría determina ciertos comportamientos generales en éstas, por lo que se explora la posibilidad de relacionar una forma integral la geometría con los valores de Ca_{lim} . Esta idea resultó en un agrupamiento lineal de los valores del límite superior del número capilar, asociados a un mismo valor de $\tilde{\alpha}$, con las longitudes respectivas; el cual sirvió como base de la serie de ajustes matemáticos, en forma de leyes de potencia, con las que se define un modelo empírico de Ca_{lim} para una razón de viscosidades igual a la unidad.

Para generalizar el modelo empírico de Ca_{lim} , se extiende el análisis numérico actual para incluir el efecto de la razón de viscosidades en la dinámica del rompimiento de gota. Lo que resultó en las gráficas de familias de curvas de Ca_{lim} y del tiempo de ruptura para distintas razones de viscosidad. Por lo que ahora, la metodología empleada para establecer el modelo empírico de Ca_{lim} se hace extensiva, también, a las familias de curvas de Ca_{lim} , resultando en una ecuación de pocos parámetros a modo de criterio de ruptura para condiciones dinámicas de flujo, la cual incluye de forma conjunta: algunos aspectos de la reología del sistema bifásico, como es la razón de viscosidades; los factores dinámicos del flujo, encapsulados en el número capilar; y una forma integral de la geometría del capilar, representada por el gradiente geométrico $\tilde{\alpha}$.

Algunos apuntes sobre el modelo empírico de Ca_{lim} son necesarios. Primeramente, debe señalarse que con la resolución del modelo BD se determina si ocurre o no la ruptura de gota, el tiempo en la que ésta ocurre y, sobretodo, la evolución de la interfase. Sin embargo, la solución del modelo no es trivial, por lo

que si se piensa, por ejemplo, en su implementación en modelos de redes de poro, conllevaría altos costos computacionales. En contraste, el modelo empírico aquí propuesto, presenta las siguientes ventajas: 1) relaciona adecuadamente las principales variables físicas del sistema con la inhibición del rompimiento de gota, 2) su comportamiento concuerda con las explicaciones teóricas de ocurrencia del rompimiento de gota fundadas en la competencia de fuerzas que se presenta en las fases líquidas 3) pueden ser implementado con facilidad en otros modelos, como los utilizados en el análisis de redes de poros.

Finalmente, deben mencionarse algunos aspectos que no fueron tratados en esta investigación y en los que se podría profundizar en trabajos futuros. El primero es la formulación de un modelo para interfases elásticas líquido-líquido, con bases similares al modelo HE pero en el que se aborden las simplificaciones hechas en éste por tratarse de un gas. Otro aspecto complementario es la consideración de comportamientos no-newtonianos en el flujo, típicos de polímeros y otros fluidos utilizados en la industria petrolera, para ser incluidos en la formulación del modelo de rompimiento de gota. Además, es de suma importancia la extensión de las metodologías y temas desarrollados en este trabajo de tesis para analizar el rompimiento de gota en capilares, hacia la modelación en redes de poros. Si bien algunos aspectos del rompimiento de gota en redes de poros fueron abordados en esta investigación de forma experimental (Anexo A.1), resta la formulación de modelos matemáticos que sean capaces de reproducir los fenómenos que se observaron durante los experimentos referidos.

LITERATURA CITADA

- Abdallah, W., Buckley, J. S., Carnegie, A., Edwards, J., Herold, B., Fordham, E., Graue, A., Habashy, T., Seleznev, N., & Signer, C. (2007). Fundamentals of wettability. *Oilfield Review*, 19(2), 44-63.
- Alvarado, D. A., & Marsden Jr, S. (1979). Flow of oil-in-water emulsions through tubes and porous media. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 19(06), 369-377.
- Alyafei, N., & Blunt, M. J. (2016). The effect of wettability on capillary trapping in carbonates. *Advances in Water Resources*, 90, 36-50.
- Armstrong, R. T., Georgiadis, A., Ott, H., Klemin, D., & Berg, S. (2014). Critical capillary number: Desaturation studied with fast X-ray computed microtomography. *Geophysical Research Letters*, 41(1), 55-60.
- Arriola, A., Willhite, G. P., & Green, D. W. (1983). Trapping of oil drops in a noncircular pore throat and mobilization upon contact with a surfactant. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 23(01), 99-114.
- Aul, R., & Olbricht, W. (1991). Coalescence of liquid drops suspended in flow through a small pore. *J. Colloid Interface Sci*, 145, 478.
- Beresnev, I., & Deng, W. (2010). Theory of breakup of core fluids surrounded by a wetting annulus in sinusoidally constricted capillary channels. *Physics of Fluids (1994-present)*, 22(1), 012105.
- Beresnev, I., Gaul, W., & Vigil, R. D. (2011a). Forced instability of core-annular flow in capillary constrictions. *Physics of Fluids (1994-present)*, 23(7), 072105.
- Beresnev, I., Gaul, W., & Vigil, R. D. (2011b). Thickness of residual wetting film in liquid-liquid displacement. *Physical Review E*, 84(2), 026327.
- Beresnev, I., Li, W., & Vigil, R. D. (2009). Condition for break-up of non-wetting fluids in sinusoidally constricted capillary channels. *Transport in Porous Media*, 80(3), 581-604.
- BP. (2015). Statistical Review of World Energy, London. from <http://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy.html>
- Bretherton, F. (1961). The motion of long bubbles in tubes. *Journal of fluid mechanics*, 10(2), 166-188.
- Cobos, S., Carvalho, M., & Alvarado, V. (2009). Flow of oil–water emulsions through a constricted capillary. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(6), 507-515.
- Cooley, J. W., & Tukey, J. W. (1965). An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. *Mathematics of computation*, 19(90), 297-301.
- Deng, W., Balhoff, M., & Cardenas, M. B. (2015). Influence of dynamic factors on nonwetting fluid snap-off in pores. *Water resources research*, 51(11), 9182-9189.
- Deng, W., Cardenas, M. B., & Bennett, P. C. (2014). Extended Roof snap-off for a continuous nonwetting fluid and an example case for supercritical CO₂. *Advances in Water Resources*, 64, 34-46.
- Eberly, D. (2008). Derivative approximation by finite differences. *Magic Software, Inc.*

- EIA. (2015). U.S. Energy Information Administration, Annual Energy Outlook 2015.
- Erpelding, M., Sinha, S., Tallakstad, K. T., Hansen, A., Flekkøy, E. G., & Måløy, K. J. (2013). History independence of steady state in simultaneous two-phase flow through two-dimensional porous media. *Physical Review E*, 88(5), 053004.
- Gary, G. (2008). *Essentials of multiphase flow and transport in porous media*: New Jersey: Wiley & Sons, Inc.
- Gauglitz, P., & Radke, C. (1988). An extended evolution equation for liquid film breakup in cylindrical capillaries. *Chemical Engineering Science*, 43(7), 1457-1465.
- Gauglitz, P., & Radke, C. (1990). The dynamics of liquid film breakup in constricted cylindrical capillaries. *Journal of Colloid and Interface Science*, 134(1), 14-40.
- Gauglitz, P., St. Laurent, C., & Radke, C. (1988). Experimental determination of gas-bubble breakup in a constricted cylindrical capillary. *Industrial & engineering chemistry research*, 27(7), 1282-1291.
- Georgiadis, A., Berg, S., Makurat, A., Maitland, G., & Ott, H. (2013). Pore-scale micro-computed-tomography imaging: Nonwetting-phase cluster-size distribution during drainage and imbibition. *Physical Review E*, 88(3), 033002.
- Gharbi, O., & Blunt, M. J. (2012). The impact of wettability and connectivity on relative permeability in carbonates: a pore network modeling analysis. *Water resources research*, 48(12).
- Guillén, V., Carvalho, M., & Alvarado, V. (2012a). Pore scale and macroscopic displacement mechanisms in emulsion flooding. *Transport in Porous Media*, 94(1), 197-206.
- Guillén, V., Romero, M., Carvalho, M., & Alvarado, V. (2012b). Capillary-driven mobility control in macro emulsion flow in porous media. *International Journal of Multiphase Flow*, 43, 62-65.
- Hammond, P. (1983). Nonlinear adjustment of a thin annular film of viscous fluid surrounding a thread of another within a circular cylindrical pipe. *Journal of fluid mechanics*, 137, 363-384.
- Han, C. D., & Funatsu, K. (1978). An Experimental Study of Droplet Deformation and Breakup in Pressure-Driven Flows through Converging and Uniform Channels. *Journal of Rheology (1978-present)*, 22(2), 113-133.
- Ho, B., & Leal, L. (1975). The creeping motion of liquid drops through a circular tube of comparable diameter. *Journal of fluid mechanics*, 71(02), 361-383.
- Hoyer, P., Alvarado, V., & Carvalho, M. (2016). Snap-off in constricted capillary with elastic interface. *Physics of Fluids (1994-present)*, 28(1), 012104.
- Jamaloei, B. Y., Asghari, K., Kharrat, R., & Ahmadloo, F. (2010). Pore-scale two-phase filtration in imbibition process through porous media at high-and low-interfacial tension flow conditions. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 72(3), 251-269.
- Kallel, W., van Dijke, M., Sorbie, K., Wood, R., Jiang, Z., & Harland, S. (2015). Modelling the effect of wettability distributions on oil recovery from microporous carbonate reservoirs. *Advances in Water Resources*.
- Knapp, R. (2008). A Method of Lines Framework in Mathematica1. *JNAIAM*, 3(1-2), 43-59.

- Kouris, C., & Tsamopoulos, J. (2000). Concentric core-annular flow in a circular tube of slowly varying cross-section. *Chemical Engineering Science*, 55(22), 5509-5530.
- Kouris, C., & Tsamopoulos, J. (2002). Core–annular flow in a periodically constricted circular tube. Part 2. Nonlinear dynamics. *Journal of fluid mechanics*, 470, 181-222.
- Kovscek, A., & Radke, C. (1996). Gas bubble snap-off under pressure-driven flow in constricted noncircular capillaries. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 117(1), 55-76.
- Kovscek, A., & Radke, C. (2003). Pressure-driven capillary snap-off of gas bubbles at low wetting-liquid content. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 212(2), 99-108.
- Kovscek, A., Tang, G.-Q., & Radke, C. (2007). Verification of Roof snap off as a foam-generation mechanism in porous media at steady state. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 302(1), 251-260.
- McAuliffe, C. D. (1973a). Crude-oil-water emulsions to improve fluid flow in an oil reservoir. *Journal of Petroleum Technology*, 25(06), 721-726.
- McAuliffe, C. D. (1973b). Oil-in-water emulsions and their flow properties in porous media. *Journal of Petroleum Technology*, 25(06), 727-733.
- Moradi, M., Kazempour, M., French, J. T., & Alvarado, V. (2014). Dynamic flow response of crude oil-in-water emulsion during flow through porous media. *Fuel*, 135, 38-45.
- Olbricht, W. (1996). Pore-scale prototypes of multiphase flow in porous media. *Annual review of fluid mechanics*, 28(1), 187-213.
- Olbricht, W., & Leal, L. (1983). The creeping motion of immiscible drops through a converging/diverging tube. *Journal of fluid mechanics*, 134, 329-355.
- Otsu, N. (1979). A Threshold Selection Method from Gray-Level Histograms. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 9(1), 62-66. doi: 10.1109/TSMC.1979.4310076
- Peña, T., Carvalho, M., & Alvarado, V. (2009). Snap-off of a liquid drop immersed in another liquid flowing through a constricted capillary. *AIChE journal*, 55(8), 1993-1999.
- Roman, S., Abu-Al-Saud, M. O., Tokunaga, T., Wan, J., Kovscek, A. R., & Tchelep, H. A. (2017). Measurements and simulation of liquid films during drainage displacements and snap-off in constricted capillary tubes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 507, 279-289.
- Romero, M. I., Carvalho, M. S., & Alvarado, V. (2011). Experiments and network model of flow of oil-water emulsion in porous media. *Physical Review E*, 84(4), 046305.
- Roof, J. (1970). Snap-off of oil droplets in water-wet pores. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 10(01), 85-90.
- Rossen, W. R. (2000). Snap-off in constricted tubes and porous media. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 166(1), 101-107.
- Rossen, W. R. (2003). A critical review of Roof snap-off as a mechanism of steady-state foam generation in homogeneous porous media. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 225(1), 1-24.

- Rossen, W. R. (2008). Comment on "Verification of Roof snap-off as a foam-generation mechanism in porous media at steady state". *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 322(1), 261-269.
- Salager, J.-L. (2005). Recuperación mejorada del petróleo. ULA.[S357-C].
- Schiesser, W. E. (2012). *The numerical method of lines: integration of partial differential equations*: Elsevier.
- Singh, K., Bijeljic, B., & Blunt, M. J. (2016). Imaging of oil layers, curvature, and contact angle in a mixed-wet and a water-wet carbonate rock. *Water resources research*.
- Skeel, R. D., & Berzins, M. (1990). A method for the spatial discretization of parabolic equations in one space variable. *SIAM journal on scientific and statistical computing*, 11(1), 1-32.
- Soo, H., & Radke, C. (1986). A filtration model for the flow of dilute, stable emulsions in porous media—I. Theory. *Chemical Engineering Science*, 41(2), 263-272.
- Soo, H., & Radke, C. J. (1984). Flow mechanism of dilute, stable emulsions in porous media. *Industrial & engineering chemistry fundamentals*, 23(3), 342-347.
- Soo, H., Williams, M., & Radke, C. (1986). A filtration model for the flow of dilute, stable emulsions in porous media—II. Parameter evaluation and estimation. *Chemical Engineering Science*, 41(2), 273-281.
- Storn, R., & Price, K. (1997). Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of global optimization*, 11(4), 341-359.
- Thomas, S., & Ali, S. F. (1989). Flow of emulsions in porous media, and potential for enhanced oil recovery. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 3(1-2), 121-136.
- Tsai, T., & Miksis, M. J. (1994). Dynamics of a drop in a constricted capillary tube. *Journal of fluid mechanics*, 274, 197-217.
- Tsai, T., & Miksis, M. J. (1997). The effects of surfactant on the dynamics of bubble snap-off. *Journal of fluid mechanics*, 337, 381-410.
- Weideman, J. A., & Reddy, S. C. (2000). A MATLAB differentiation matrix suite. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 26(4), 465-519.
- Zhang, H., Nikolov, A., Feng, J., & Wasan, D. (2016). The dynamics of the annular liquid layer inside a cylindrical capillary. *Physics of Fluids*, 28(2), 024107.
- Zorin, Z., & Churaev, N. (1992). Immiscible liquid-liquid displacement in thin quartz capillaries. *Advances in colloid and interface science*, 40, 85-108.

A. ANEXOS

A.1 EXPERIMENTOS DE MICROFLUÍDICA

Como parte de este trabajo de tesis, se efectuaron una serie de experimentos de microfluídica con el objetivo de visualizar el comportamiento de gotas de emulsión fluyendo a través de un medio poroso bidimensional.

Los experimentos que a continuación se exponen fueron realizados en el Laboratorio de Microhidrodinámica y Medios Porosos (LMMP), perteneciente al departamento de Mecánica en la Pontificia Universidad Católica de Río de Janeiro (PUC-Rio). La temperatura del laboratorio fue controlada mediante el uso del sistema de aire acondicionado para mantenerse en 23°C. Todos los procedimientos y mediciones propias del experimento fueron realizados en esa temperatura.

El procedimiento experimental consistió básicamente en la inyección controlada de emulsiones monodispersas en un dispositivo transparente formado de una red de microcanales con constricciones montado en un microscopio óptico con cámara digital, para analizar los mecanismos que ocurren durante el flujo de éstas por el medio poroso como puede ser ruptura, atrapamiento o deformación al pasar por constricciones.

A continuación se describen detalladamente los materiales y métodos utilizados en estos experimentos.

A.1.1 Formación de emulsiones monodispersas

Las emulsiones monodispersas son de gran utilidad debido a su estabilidad y control de sus propiedades. En esta tesis se utilizan emulsiones monodispersas para tener un mayor control del tamaño de las gotas de ésta, y así poder monitorear de forma precisa los mecanismos que ocurren durante el flujo en el medio poroso.

Los apartados siguientes describen el procedimiento que se siguió para formar emulsiones monodispersas.

A.1.1.1 Preparación de las fases de la emulsión

La formación de emulsiones en laboratorio se inició con la preparación de las fases. Las emulsiones que se utilizaron en los experimentos de esta tesis son del tipo aceite en agua (O/W). El aceite empleado (fase dispersa) fue de tipo mineral, Drakeol7, al que se le añadió colorante sólido, 0.033 g/l, para un mejor contraste durante su observación en el microscopio. La fase continua fue agua desionizada, a la cual se le agregó surfactante laurilsulfato de sodio (SLS, $C_{12}H_{25}NaO_4S$) en una proporción de 4.6 g/l (dos veces su concentración micelar crítica) para asegurar la estabilidad de la emulsión. Ambas fases fueron filtradas con membranas de 0.5 μm antes de su utilización para evitar impurezas. Las sustancias que fueron añadidas a las fases se mezclaron utilizando un agitador magnético CORNING PC-420D a 150 rpm durante 4 h. La Figura A1.1 muestra algunas etapas de la preparación de la fase continua. La solución de agua con surfactante tiene una viscosidad a 23°C de $\mu_c = 0.97$ mPa, mientras que el aceite de $\mu_d = 20.0$ mPa ; la presión superficial del sistema es $\sigma = 11.8$ mN/m.

Una vez preparadas las fases son almacenadas en recipientes de vidrio (Figura A1.2), siendo éstas los insumos básicos en la preparación de emulsiones. Para producir emulsiones se utilizaron dos técnicas microfluídicas: 1) Flujo cruzado en microdispositivo *T-Junction*, 2) Co-flujo en microdispositivo de capilares.



a)

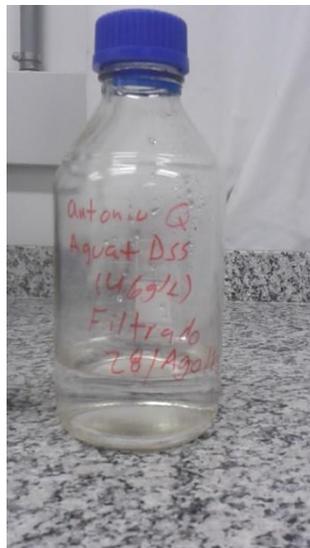


c)



b)

Figura A1.1 Preparación de la fase continua a) Surfactante en polvo SLS b) Agitador magnético c) Vaso de vidrio con agua desionizada y surfactante siendo mezclados en el agitador magnético a 150 rpm.



a)



b)

Figura A1.2 Después de ser preparadas, las fases son almacenadas en frascos de vidrio a) Fase continua (agua con surfactante) b) Aceite Drakeol7 con colorante.

A.1.1.2 Flujo cruzado en microdispositivo T-Junction

Para formar emulsiones monodispersas con la técnica microfluídica de flujo cruzado, se utilizó un microdispositivo del tipo *T- Junction* de vidrio (Dolomite®). El dispositivo está diseñado para aplicaciones como la mezcla de fluidos, micro-reacciones y la formación de gotas. Consiste de dos microcanales hidrofílicos, de sección transversal oval constante. Los microcanales se unen en un punto formando una bifurcación en forma de “T”, donde se cruzan los flujos, para inducir la ruptura de una de las fases; después de este punto de cruce, el canal horizontal de la “T” (Canal 2 en la Figura A1.3) continúa hasta llegar al punto de salida del flujo. En la Figura A1.3 se muestran sus principales características y componentes.

Algunas de las ventajas de este microdispositivo es que es compacto, tiene una alta visibilidad; de acuerdo con el fabricante la superficie de los canales es muy lisa, permite trabajar con un amplio rango de temperaturas y presiones, además de tener una excelente compatibilidad química.

A continuación se describe el protocolo experimental que se siguió para formar emulsiones monodispersas en este microdispositivo. Primeramente se llenaron jeringas de plástico (BD *plastipak*) con las fases, una con la solución que se preparó de agua con surfactante y otra con el aceite con colorante. Cada una de las jeringas se conectó a una manguera transparente, que a su vez se conectó al microdispositivo *T- junction*. La conexión de las jeringas a las mangueras se hizo mediante accesorios de microfluídica: una válvula de tres vías y un conector. La manguera que corresponde a la que será la fase dispersa, en este caso aceite, se conectó a la ranura que coincide con el canal vertical de la “T” (canal 1 en la Figura A1.3), la manguera con la fase continua al canal horizontal. Una tercera manguera se conectó a la ranura que coincide con el canal de salida del microdispositivo, la cual va hacia un vial de colecta. Para inyectar los fluidos al microdispositivo se utilizaron bombas de jeringa (*Harvard apparatus 11 Elite*).

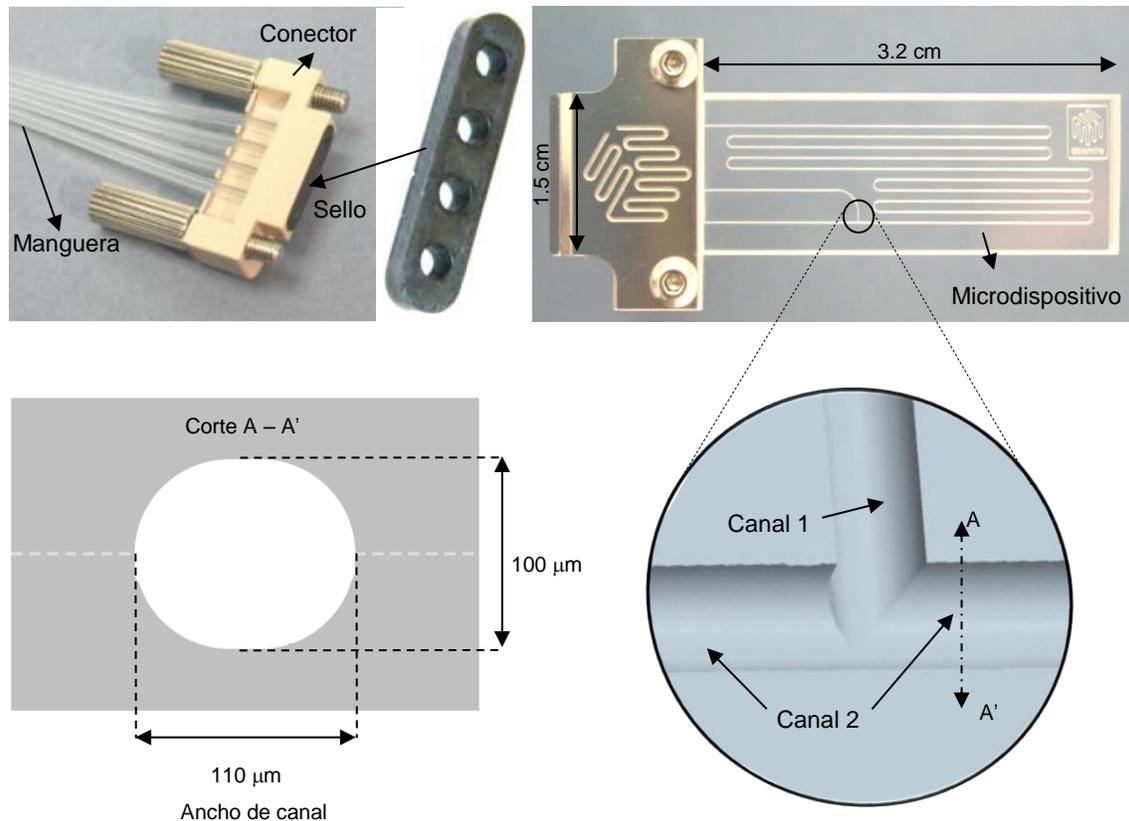


Figura A1.3 Microdispositivo *T-junction* de Dolomite®. En la parte superior de la figura se muestran los accesorios de conexión y dimensiones del microdispositivo; abajo se especifica la geometría de los canales y la configuración de la junta en forma de “T”.

El sistema de bombas, jeringas, conexiones y mangueras descrito, se instaló cerca de un microscopio óptico invertido *Axiovert 40MAT* (*Carl Zeiss*), de tal forma que el microdispositivo quedara montado en este último. A este microscopio se le adaptó una cámara *PixelINK PL-A662*, que trasmite imágenes en tiempo real hacia una computadora permitiendo la visualización de las mismas en un monitor mediante el *software* de la cámara (versión 3.2). En la Figura A1.4 se esquematiza el montaje experimental referido.

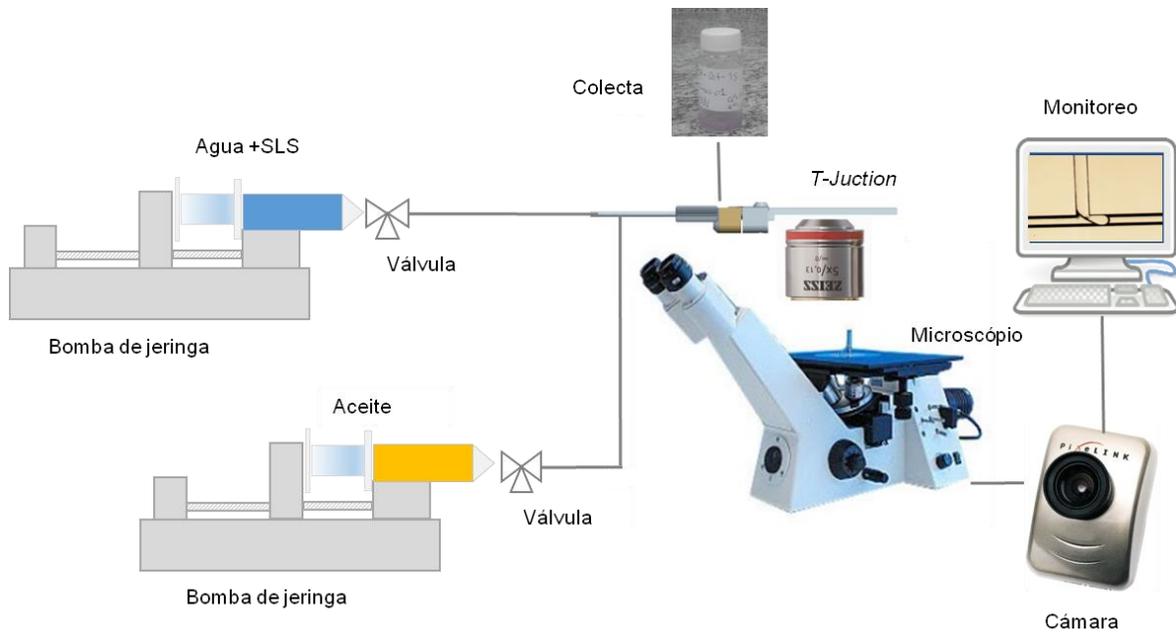


Figura A1.4 Esquema del montaje experimental durante la formación de emulsiones con el microdispositivo *T-Junction*.

La tasa de inyección entre ambas fases se varió en cada experimento para obtener distintos tamaños de gota y concentraciones. La Figura A1.5 muestra una toma microscópica del momento en que ambas fases coinciden en la unión de los canales, próximo al instante de ruptura.

En la salida del microdispositivo se recolectó la emulsión formada para observarla en el microscopio, y realizar un tratamiento de imágenes; con ello se determinó el tamaño de promedio de las gotas formadas y su monodispersidad. En la Figura A1.6, por ejemplo, se muestran las gotas formadas con tasas de inyección de las fases continua y dispersa de $Q_c = 0.01 \text{ ml/h}$ y $Q_d = 0.15 \text{ ml/h}$, respectivamente.

En el procedimiento arriba descrito, para un gasto de inyección arriba de aproximadamente 5 ml/h de alguna de las fases se presenta la invasión del otro canal perdiendo la estabilidad y con ello la monodispersión. Por lo que con este procedimiento se pudieron obtener solamente emulsiones monodispersas con un

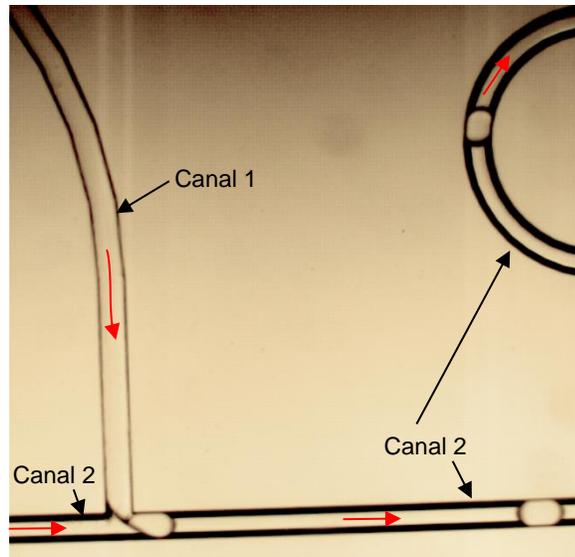


Figura A1.5 Toma microscópica durante la inyección de las fases en el dispositivo T-Junction para la formación de emulsiones aceite en agua (O/W). Por el Canal 1 fluye el aceite de forma continua y por el Canal 2, hasta antes de la unión, la solución de agua con surfactante. En el punto que coinciden ambos flujos se produce esfuerzos cortantes que provocan que el aceite pierda la continuidad, formándose gotas de aceite que fluyen junto con el agua hacia la salida del microdispositivo.

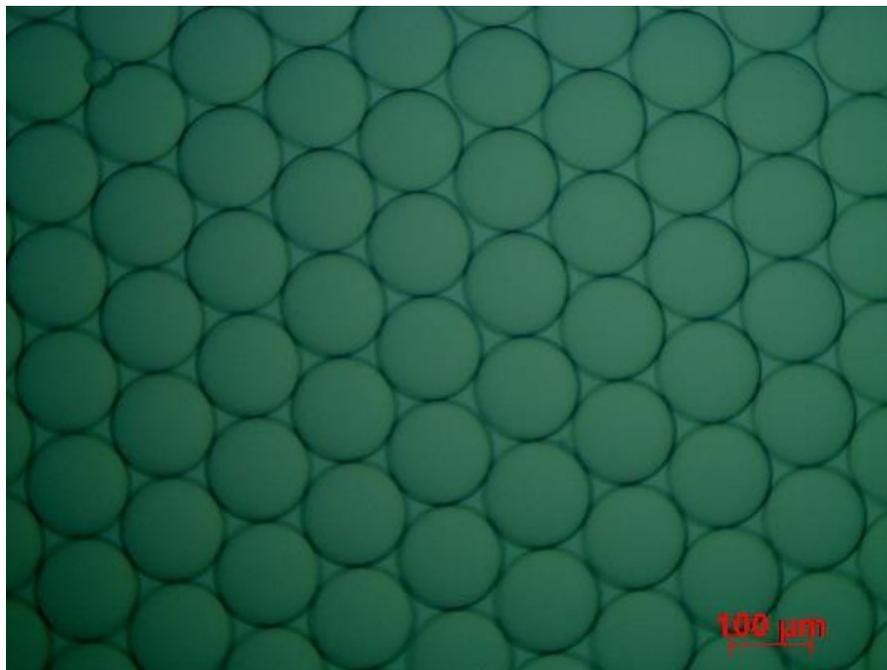


Figura A1.6 Gotas de una emulsión de aceite en agua (O/W) producidas con el microdispositivo *T-Junction*. Se utilizó el software AxioVision 4.6 para medir los tamaños de gota de la muestra. El tamaño promedio fue de 130 μm . La toma se hizo en un microscopio OMAX 40X-1000X con un objetivo de 10x.

tamaño de gota menor a 165 μm . Debido a esta limitante se buscó otro procedimiento para la formación de emulsiones en los que se lograra obtener mayores tamaños de gota.

A.1.1.3 Co-flujo en microdispositivo de capilares

Como alternativa para el proceso de formación de emulsiones se utilizaron microdispositivos fabricados en el laboratorio. Estos dispositivos son construidos con tubos capilares alineados coaxialmente de 1 mm de longitud característica: 1 microcapilar cuadrado (contenedor) y 2 microcapilares circulares (inyector y colector). El canal inyector y el colector son reducidos en uno de sus extremos en función del tamaño de gota que se busca obtener e introducidos en el capilar cuadrado que los contiene (Ver Figura A1.7). Se trabajó con dos geometrías (diámetro de inyección – separación entre capilares – diámetro de colector): 80 – 120 – 150 μm denominada de gota pequeña y 80 – 120 – 180 μm de gota grande.

Para la formación de emulsiones con estos dispositivos se utilizaron las mismas fases líquidas caracterizadas en A.1.1.1. La técnica para formar emulsiones consiste en la inyección, mediante bombas de jeringas, de la fase continua (agua) por el capilar contenedor y la fase dispersa (aceite) por el canal inyector; esta última pierde la continuidad al ser reducida por la presión ejercida por la fase continua en la región que separa a los capilares, resultando gotas de aceite en agua que fluyen a través del colector. Lo anterior se esquematiza en la Figura A1.8.

Para el seguimiento y control del proceso de formación de emulsiones los dispositivos de microcapilares fueron montados sobre un microscopio Nikon SMZ745T con cámara PIXELINK PL-B742U (Figura A1.9). Este sistema fue testado con una serie de tasas de inyección en ambas fases para obtener gotas de distintos tamaños: con la geometría de gota pequeña se obtuvieron gotas en un rango de 100 - 150 μm y en la de gota grande de 160 - 250 μm .

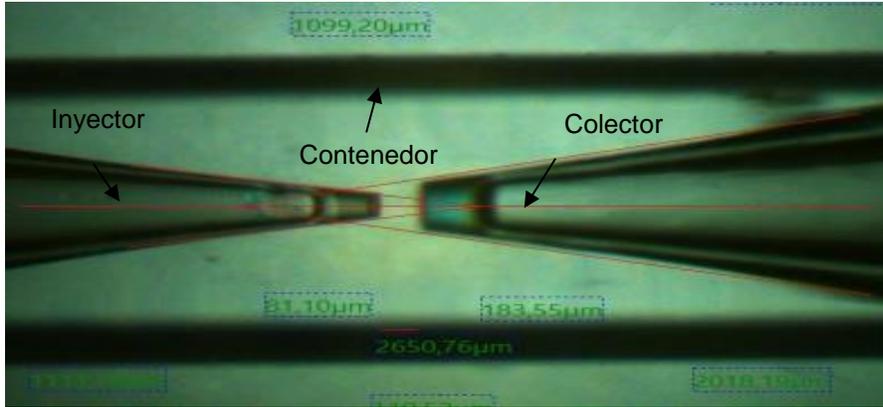


Figura A1.7 Microdispositivo fabricado en el laboratorio (LMMP) **a)** Vista exterior: el canal colector está conectado a dos inyector (en amarillo) que sirven como una de las entradas y salidas del flujo **b)** Toma microscópica de los tubos capilares durante su alineamiento para dispositivo de gota pequeña.

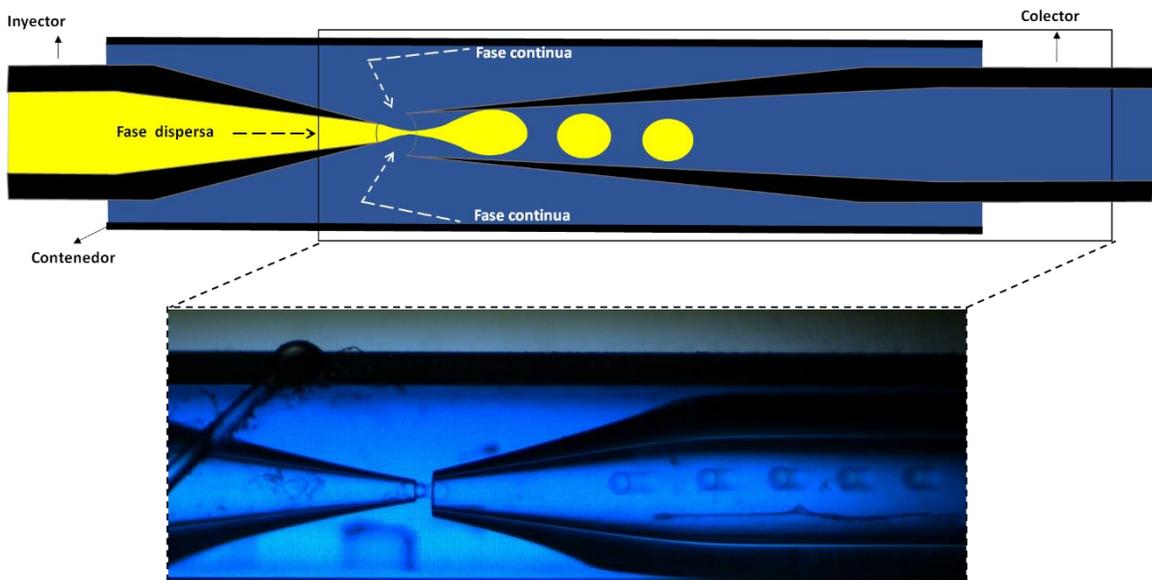


Figura A1.8 En la parte superior se muestra el esquema de canales el flujo de las fases y el proceso de formación de gotas. Abajo una toma microscópica durante este proceso.

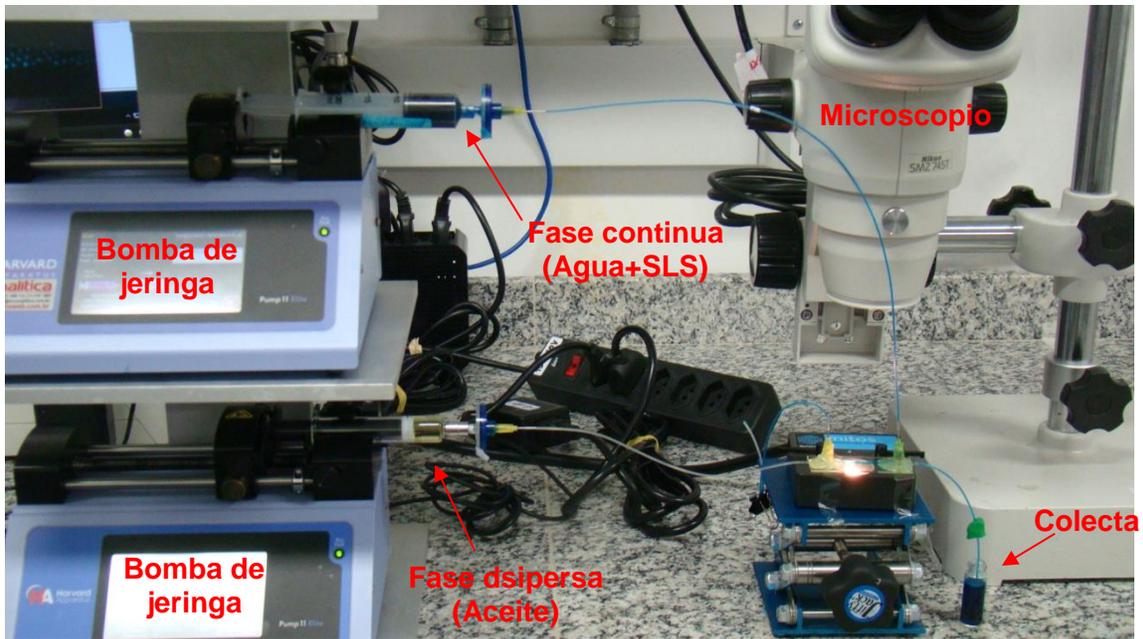


Figura A1.9 Sistema experimental instalado para la formación de emulsiones.

A.1.2 Flujo de emulsiones en un medio poroso bidimensional

Con el objetivo de visualizar los mecanismos del flujo de una emulsión a escala de poro y el proceso de recuperación de aceite residual en forma de gotas, las emulsiones generadas se inyectaron de forma controlada en un dispositivo de microfluídica que reproduce artificialmente un medio poroso bidimensional. A continuación se describen los materiales y la metodología experimental que se siguió para ello.

A.1.2.1 Micromodelo de vidrio

El dispositivo de microfluídica utilizado está compuesto de microcanales interconectados con constricciones de diferentes tamaños que simulan las gargantas de poros en un medio poroso. Este dispositivo es comercializado por *Dolomite Microfluidics*, una de sus principales ventajas es su rigidez, lo que evita deformaciones de los canales que ocurren en dispositivos de PDMS

(Polidimetilsiloxano), que son generalmente utilizados en este tipo de estudios. La Figura A1.10 muestra un esquema con las dimensiones del micromodelo.

La geometría de este micromodelo consiste en una retícula de canales rectos y con constricción que constituyen el medio poroso. En los extremos de la retícula se encuentran los canales de entrada y salida que se bifurcan dos veces para una distribución uniforme del flujo, lo que resulta en cuatro puntos de entrada y salida, respectivamente. Los canales rectos tienen un diámetro de 110 μm y las constricciones de 85 y 63 μm , y su ubicación es aleatoria en una retícula de 8 x 8 nodos, la cual se repite 150 veces. En esta retícula base se tienen 38 constricciones de 63 μm , 40 de 85 μm y 50 canales de 110 μm . En la Figura A1.10 y Figura A1.11 se dan más detalles de la geometría básica del dispositivo.

A.1.2.1 Inyección de emulsiones en el micromodelo

El proceso de inyección de emulsiones monodispersas se inició mediante la saturación del micromodelo (inicialmente vacío) con la solución agua + surfactante que corresponde a la fase continua. La saturación se hizo con ayuda de una bomba de jeringa. Una vez saturado, el microdispositivo se montó en un microscopio Nikon SMZ 745T con una cámara de alta velocidad PIXELINK PL-B742U (1000 fps) conectada a una computadora. Después el dispositivo se conecta a un sistema de bomba, válvulas y jeringa que contiene la emulsión, el cual se muestra en la Figura A1.12. El modelo que se utilizó tiene una superficie hidrofílica, un volumen poroso de 30 μl , porosidad de $\phi = 0.5$ y permeabilidad de 79 D.

Una vez montado el sistema, se procedió a inyectar la emulsión. En todos los experimentos se trabajó con aproximadamente 30 μl de gotas de aceite que fueron transportadas a través de una manguera hacia el micromodelo mediante la inyección agua con surfactante a 0.3 ml/h (ver Figura A1.13). Durante la inyección de las emulsiones se grabaron videos a 500 fps para tener un registro que permitiera

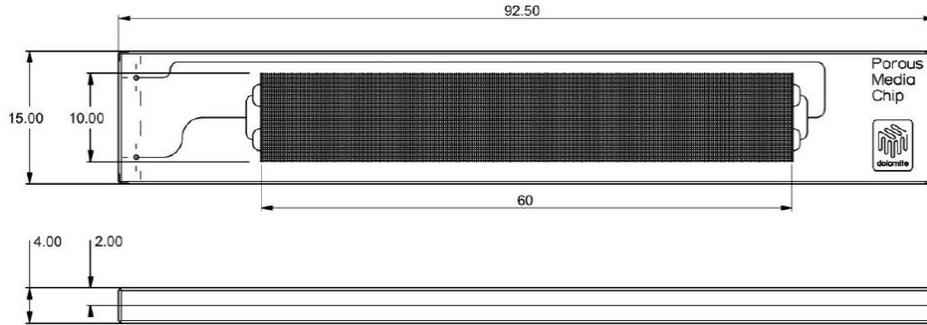


Figura A1.10 Esquema del micromodelo de vidrio comercializado por *Dolomite Microfluidics*. Las medidas son en milímetros.

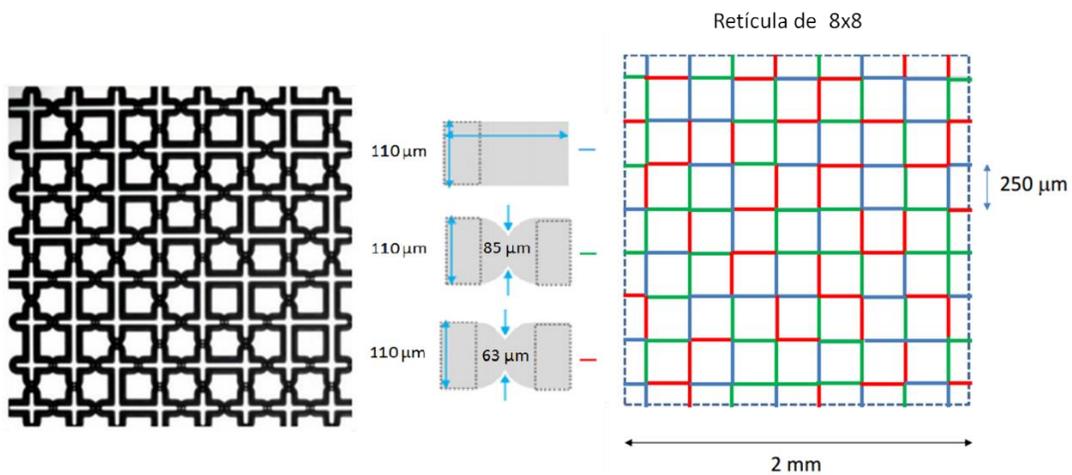


Figura A1.11 Configuración geométrica de la retícula base del micromodelo.

evaluar la dinámica de las gotas durante su flujo a través de los canales y constricciones.

Después de haber inyectado toda la emulsión se procedió a tomar sistemáticamente fotos de todo el microchip (108 fotos por experimento) para registrar el tamaño final y distribución espacial de las gotas de aceite una vez que han sido afectadas por el flujo dentro del medio. La Figura A1.14 muestra una toma de una zona del micromodelo antes y después de la inyección de la emulsión.

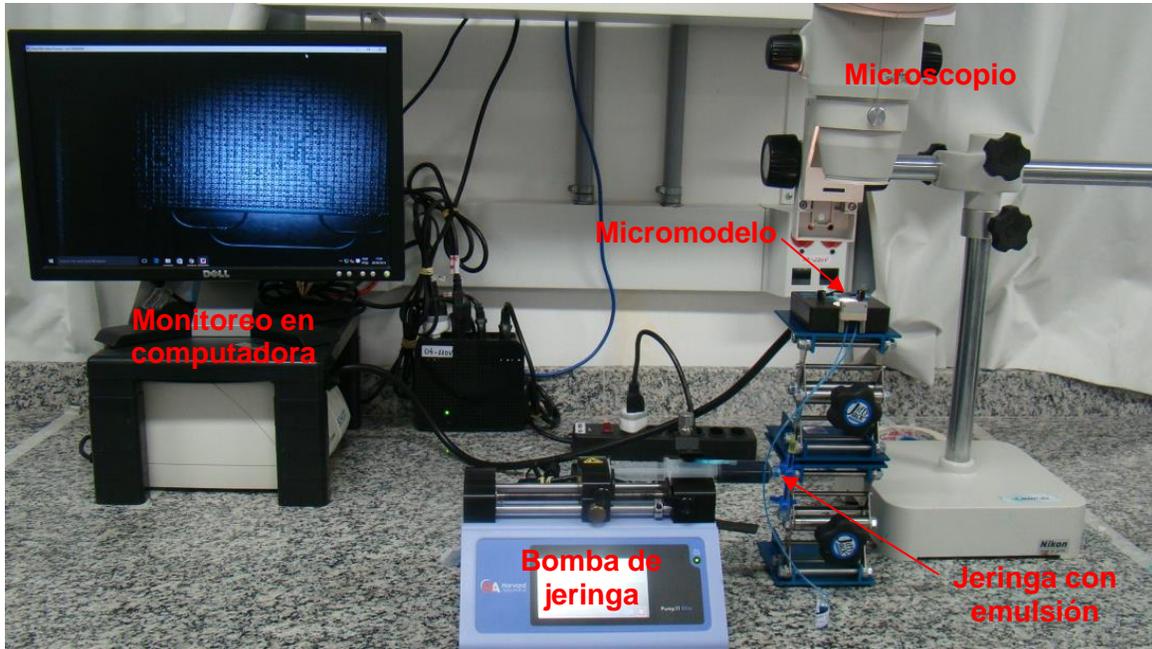


Figura A1.12 Sistema experimental instalado para la inyección de emulsiones, conformado por la bomba de jeringa, el microdispositivo montado en el microscopio con cámara, el monitoreo por computadora, la conexión de mangueras al microdispositivo y frascos para la recolección de emulsiones.

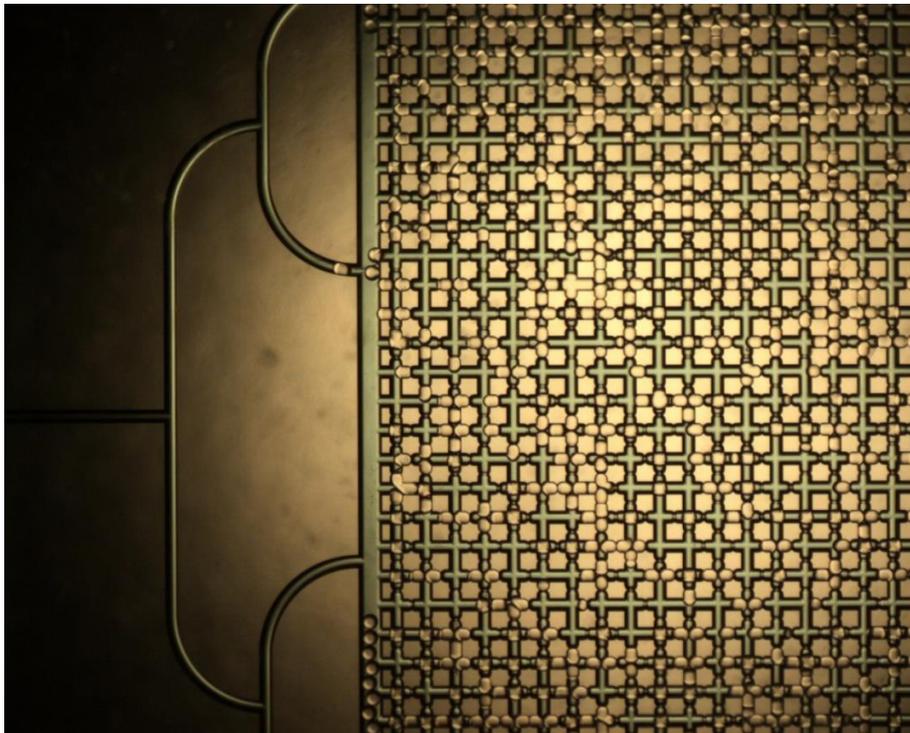


Figura A1.13 Gotas de aceite (en blanco) entrando al micromodelo saturado con agua (en verde). La toma microscópica se hizo con un objetivo de 2x.

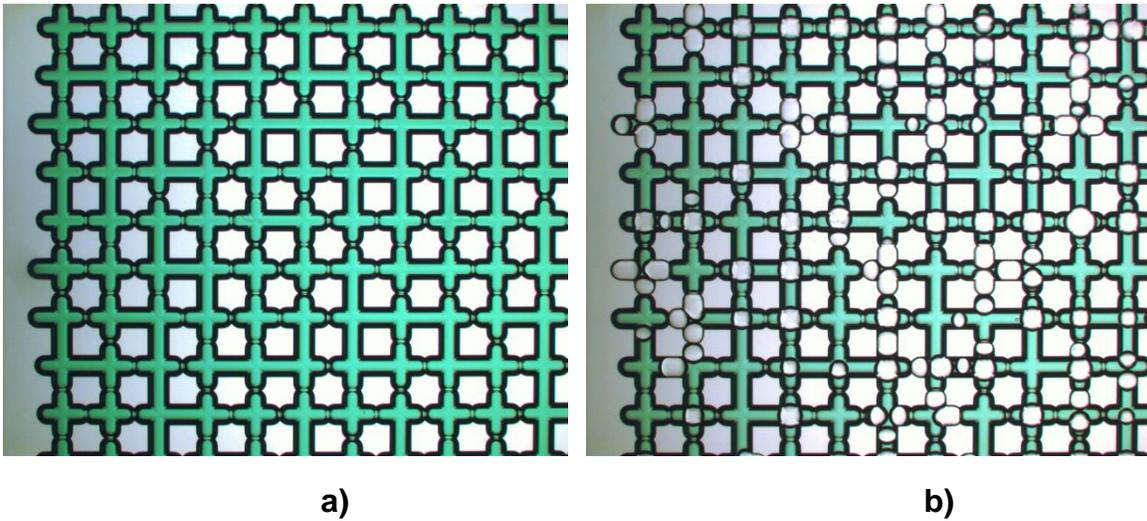


Figura A1.14 Toma microscópica (con objetivo de 2.5x) de una zona del micromodelo a) Saturado con agua b) Al final de la inyección de gotas de emulsión.

A.1.2.2 Recuperación de aceite residual

Con las gotas de aceite dentro del microchip se definió un estado de aceite residual, simulando las condiciones de un yacimiento después de una etapa de recuperación primaria. Por lo que a fin de conocer la recuperación de aceite que se tendría dada una morfología de gotas inicial, se inyectó agua con surfactante (recuperación secundaria) a 15 ml/h y se recolectó a la salida del microchip las gotas que lograron atravesar el medio poroso. Posteriormente se toman fotos de todo el micromodelo (Figura A1.15) y de las gotas de la emulsión recuperada (Figura A1.16), pudiendo así determinar el porcentaje de recuperación además de la morfología de las gotas que quedaron y salieron del micromodelo.

A.1.2.3 Tratamiento de imágenes

Como se ha mencionado, durante las diferentes etapas del procedimiento experimental fueron tomadas fotos con las cámaras instaladas en los microscopios empleados. Se tienen tomas microscópicas de gotas de emulsión dentro del micromodelo: entrando, al final de la inyección de éstas y después del proceso de

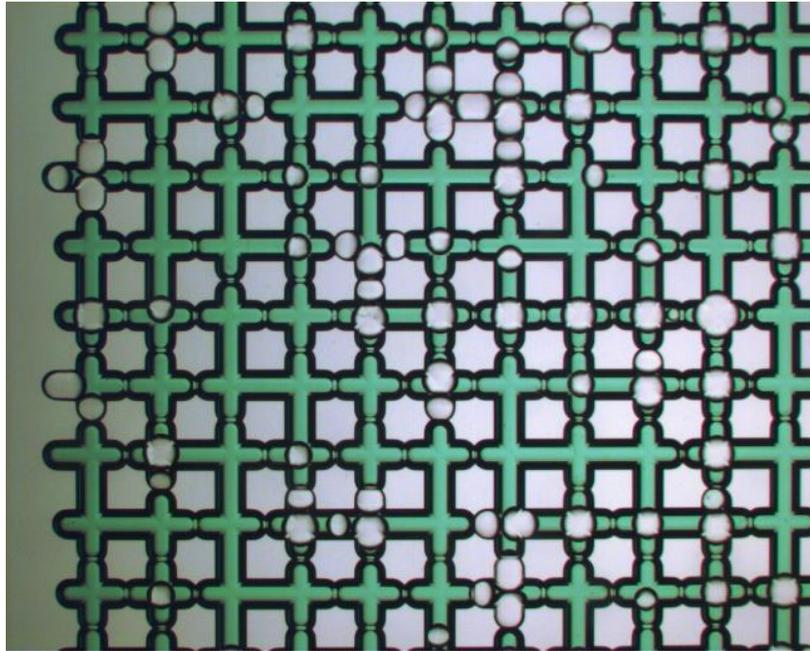


Figura A1.15 Aspecto de la misma zona mostrada en la Figura A1.14b después de la inyección con agua con surfactante (recuperación secundaria). A simple inspección visual se aprecia una disminución considerable del número de gotas.

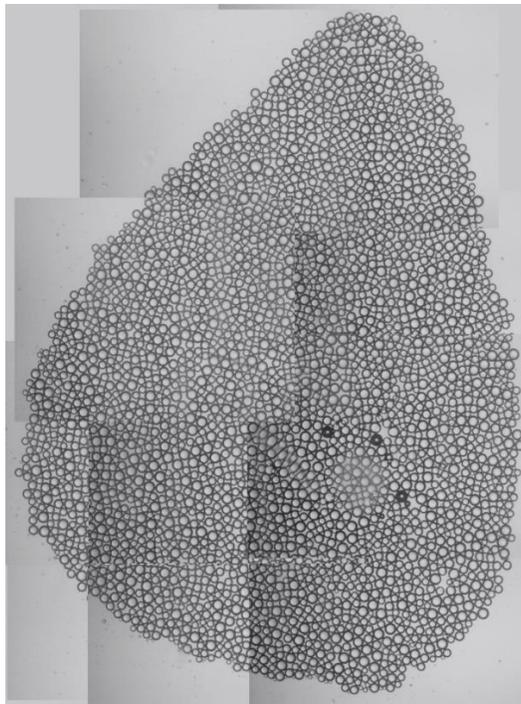


Figura A1.16 Toma microscópica (con objetivo de 2.5x) de las gotas que consiguieron atravesar el micromodelo. En la imagen se aprecia que se ha perdido la monodispersión de las gotas.

desplazamiento con agua. Además fuera del micromodelo: antes de ser inyectadas y después del proceso de recuperación con agua. De tal forma que para determinar con precisión los cambios que van aconteciendo en el tamaño y en la cantidad de gotas durante el flujo de estas en el micromodelo se requirió de técnicas de tratamiento de imágenes. Así mismo, la cantidad de fotos e información en cada experimento requirió que este proceso de tratamiento se automatizara. Para el tratamiento de imágenes se utilizó el software “Image-J” el cual es de distribución gratuita y tiene la opción de programar los procedimientos que ahí se llevan a cabo.

A continuación se describe el procedimiento que se utilizó para determinar el tamaño de las gotas dentro del micromodelo utilizando los algoritmos de tratamiento de imágenes implementados en *Image-J*. Como insumos básicos se tiene la imagen de una zona del micromodelo saturado con agua y otra con gotas de las que se desea conocer el número y tamaño, como es el caso de la Figura A1.14. Estas imágenes se convierten al tipo de 8-bit para poder aplicar técnicas de *thresholding* para la segmentación de objetos; en específico se utilizó el algoritmo de Otsu (1979). Después se hace una operación de imágenes utilizando el operador XOR (disyunción exclusiva) que hace que la imagen saturada con agua funcione como una máscara con lo que las gotas quedan como los únicos objetos visibles. Finalmente se hace un análisis y medición de partículas (*Analyze particles*) con lo que se detectan y miden las principales características geométricas de las gotas. La Figura A1.17 muestra el resultado de este proceso en la imagen de la Figura A1.15.

A.1.3 Resultados obtenidos

Con las técnicas de tratamiento de imágenes que se describieron en A.1.2.3 aplicadas en las fotografías microscópicas tomadas durante los experimentos de flujo de emulsiones en el micromodelo se obtuvo bastante información del estado de las gotas en las diferentes etapas experimentales, como lo es su área en píxeles.

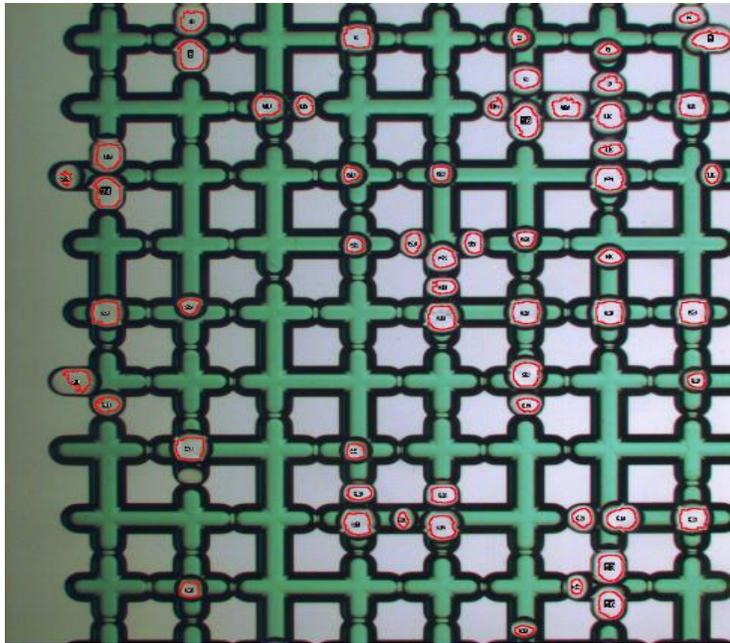


Figura A1.17 Gotas detectadas mediante los algoritmos de *Image-J*.

Uno de los parámetros que se monitoreó fue el tamaño de las gotas. Éstas al recorrer el medio poroso, atraviesan constricciones, se deforman o se quiebran y buscan caminos preferenciales para llegar a la salida del micromodelo; otras permanecen en el medio bloqueando algunas constricciones y formando nuevos para las demás gotas. Por lo anterior resulta importante conocer el cambio de tamaño que experimentan estas gotas a fin de conocer cómo influye este parámetro en el proceso de recuperación.

La distribución del tamaño de las gotas (DTG) de la emulsión es monitoreada desde su formación en los dispositivos de microfluídica, antes de su inyección al micromodelo y durante los diferentes escenarios de flujo dentro del medio. Una forma de caracterizar estas gotas es mediante su relación en diámetro con el de los canales del micromodelo, a esta relación se le nombra DD, y se define como $DD = \phi_{\text{canal}} / \phi_{\text{gota}}$, donde ϕ_{canal} y ϕ_{gota} , son los diámetros del canal y de las gotas respectivamente; ϕ_{canal} tiene un valor constante de $\phi_{\text{canal}} = 100\mu\text{m}$

A continuación se muestra el resultado del tratamiento de imágenes en experimentos con diferentes tamaños de gota, y por lo tanto DD, para un mismo régimen de flujo: gotas entrando bajo un régimen de inyección de 0.3 ml/h e inyección de agua a 15 ml/h para recuperación de aceite residual.

A.1.3.1 DTG para $DD \approx 1.25$

El resultado del tratamiento de imágenes para gotas con diámetro de aproximadamente $125\mu\text{m}$ se muestra en la Figura A1.18.

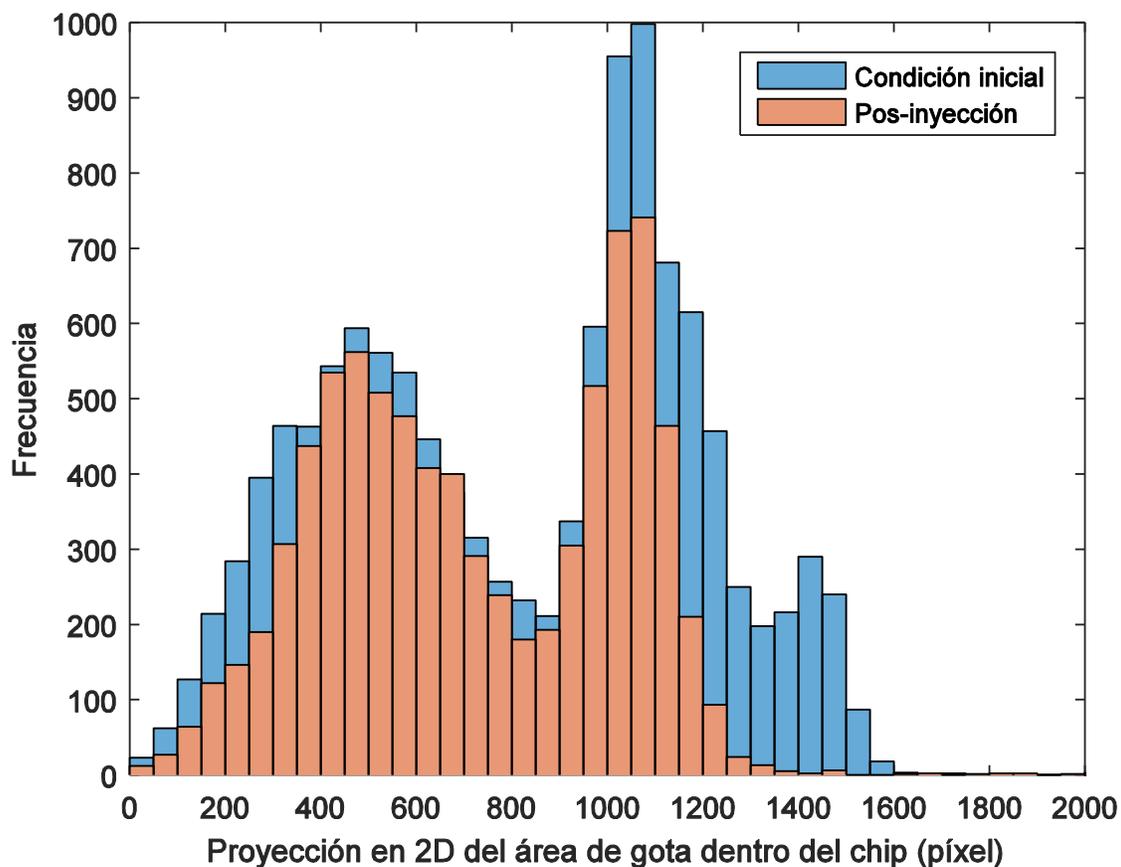


Figura A1.18 Distribución de áreas de gota al entrar al chip (en azul) y después de la recuperación con agua + surfactante (en marrón). El área original de las gotas de $125\mu\text{m}$ dentro del chip es aproximadamente 1100 píxel.

A.1.3.2 DTG para $DD \approx 1.60$

La distribución de tamaños de gotas para un diámetro de aproximadamente $160 \mu\text{m}$ se muestra en la Figura A1.19:

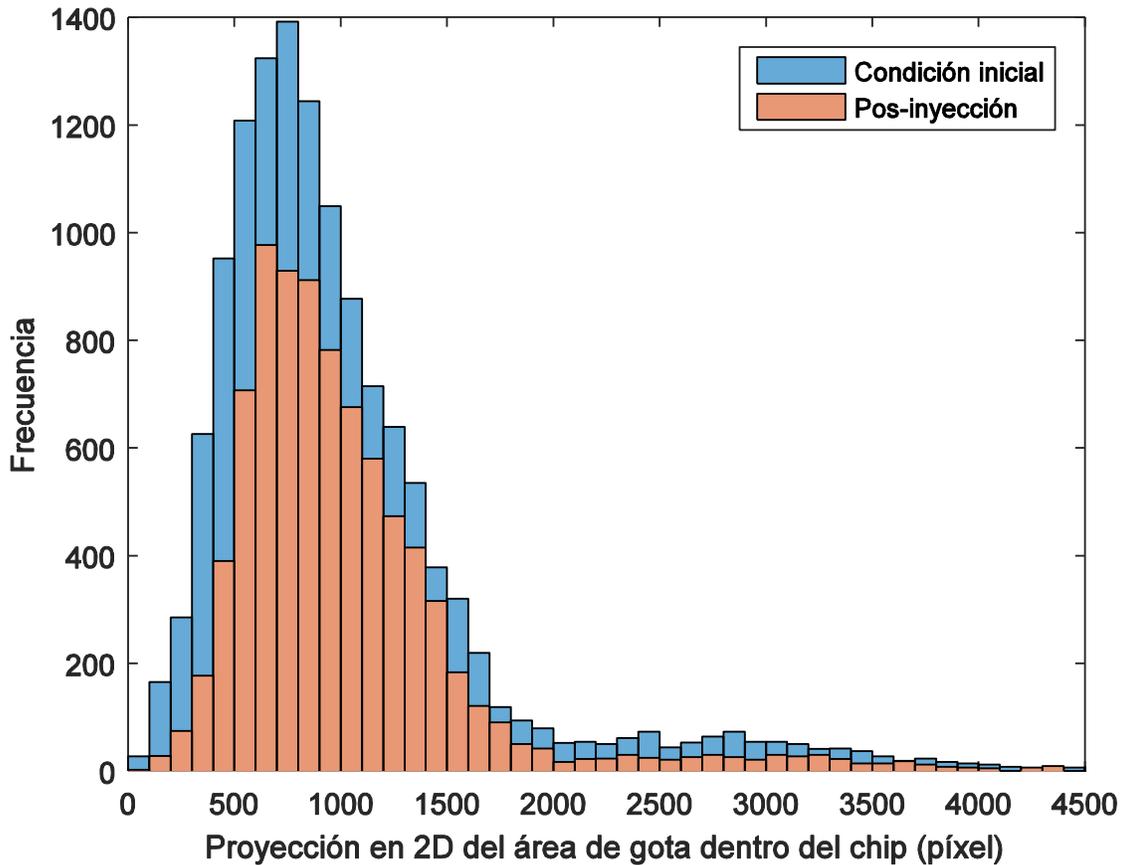


Figura A1.19 Distribución de áreas de gota al entrar al chip (en azul) y después de la recuperación con agua + surfactante (en marrón). El área de las gotas de $160 \mu\text{m}$ dentro del chip es aproximadamente 1600 píxel.