

Modelado y simulación de flujo tipo Taylor en capilares

Natividad-Rangel, R. ; Ramírez-Serrano, A. ; Romero-Romero, R. ; Hernández-Servín, J. A. 

Información del Artículo

Recibido: 2 de enero, 2026
Aceptado: 3 de abril, 2026

Palabras clave: flujo tipo Taylor, simulación numérica, microfluidica, COMSOL Multiphysics, flujo bifásico

Resumen

En objetivo de este trabajo es presentar un modelo de simulación numérica del tipo Taylor que se desarrolla en capilares. Para llevar a cabo este análisis, se empleó el entorno de software [1] en su versión 6.2, una herramienta robusta y ampliamente reconocida en el ámbito de la simulación multifísica.

El flujo tipo Taylor se distingue por la generación secuencial de burbujas elongadas de gas, las cuales se alternan con secciones de líquido, creando un patrón periódico. Este fenómeno resulta de particular interés debido a su relevancia en diversas aplicaciones, que abarcan desde los micro fluidos, donde el control preciso de fluidos a pequeña escala es crucial, hasta los sistemas de intercambio de calor, donde la eficiencia en la transferencia de energía es primordial.

Con el objetivo de explorar a detalle este tipo de flujo, se llevó a cabo un conjunto exhaustivo de simulaciones, comprendiendo un total de 32 casos. Estas simulaciones se desarrollaron en un dominio bidimensional con simetría axial, lo que permitió capturar la esencia del flujo de manera eficiente.

Se procedió a variar sistemáticamente una serie de parámetros clave, tales como el diámetro del capilar (3-4 mm), el espesor de la película líquida que recubre la pared del capilar (25-50 μm), la velocidad del fluido (0.02, 0.05, 0.2 y 0.5 m/s) y, finalmente, dos tipos distintos de condiciones de contorno: la condición de entrada que simula una alimentación constante de fluido, y la condición periódica que asume un comportamiento repetitivo del flujo a lo largo del capilar.

Los hallazgos derivados de este estudio permiten discernir el impacto específico de cada parámetro sobre la dinámica de las burbujas y la estabilidad de la película líquida en sistemas de microfluidos basados en el flujo bifásico en canales confinados. Se identificaron, en particular, aquellas condiciones que propician un flujo estable y simétrico, características deseables en muchas aplicaciones.

Introducción

En la industria química, los sistemas multifásicos son esenciales debido a su eficacia en la transferencia de masa y calor, lo que los convierte en componentes clave de diversos procesos. Uno de estos procesos es el flujo tipo Taylor, reconocido por ser una opción eficiente para mejorar la transferencia de masa gracias a su alta relación área-volumen y su flujo ordenado. Este tipo de flujo se caracteriza por la formación de burbujas de gas separadas por segmentos de líquido dentro de un canal capilar (1-4 mm), generando un amplio contacto interfacial entre las fases y mejorando la eficiencia en los procesos de transporte Fishwick et al. [2].

Aplicaciones interesantes de este tipo de sistema es la hidrogenación selectiva de alquinos, absorción de CO₂ Natividad et al. [3]. De hecho, la Universidad Autónoma del Estado de México cuenta con el título de patente Peña et al. [4], Fishwick et al. [2], de un foto-reactor capilar donde se ha demostrado las ventajas del flujo tipo Taylor, combinado con luz para realizar reacciones multifásicas selectivas Peña et al. [4]

A pesar de sus ventajas, el estudio del comportamiento hidrodinámico del flujo tipo Taylor sigue presentando retos importantes, considerar factores como: el diámetro del capilar, la velocidad de las fases y las propiedades interfaciales de los fluidos que influyen considerablemente en su dinámica, complicando su análisis teórico. La complejidad de este fenómeno

ha impulsado el desarrollo de modelos matemáticos y herramientas de simulación para predecir su comportamiento bajo diferentes condiciones operativas.

Para enfrentar este desafío, se han creado modelos matemáticos que describen de manera precisa la hidrodinámica del flujo tipo Taylor. Las simulaciones numéricas desempeñan un papel fundamental en la comprensión y optimización de este flujo, facilitando su diseño y mejorando su aplicación en entornos industriales. En este contexto, el uso de software especializado como [1] resulta clave; ya que es una herramienta que permite modelar la dinámica de sistema al resolver las ecuaciones acopladas con modelos de cantidad de movimiento, masa y calor; además, su implementación en simulaciones computacionales permite evaluar diferentes parámetros en la formación y evolución del flujo, sentando las bases para la optimización de procesos multifásicos.

Generalidades

El estudio de los flujos multifásicos en microcanales ha cobrado una importancia creciente debido a su impacto en diversas áreas, desde la producción de compuestos químicos hasta innovaciones en biotecnología y medicina. Entre estos flujos, el flujo tipo Taylor ha captado un gran interés porque se caracteriza por la formación de burbujas de gas separadas por segmentos de líquido dentro de un canal estrecho (ver Figura 1). No solo es visualmente distintivo, sino que también ofrece ventajas significativas en términos de transferencia de masa, calor y cantidad de movimiento, lo que lo hace más eficiente que los flujos monofásicos tradicionales [5, 6].

El desarrollo de herramientas computacionales como [1] ha permitido que el análisis de estos sistemas sea cada vez más preciso y es posible predecir con gran detalle cómo se comportan las burbujas dentro de los capilares, cómo interactúan con el líquido circundante y cómo afectan la eficiencia de los procesos en los que están involucradas. Modelar estos flujos no solo ayuda a entender mejor su dinámica, sino que también permite optimizar su aplicación en distintos campos de la ciencia y tecnología Butler et al. [7].

El flujo tipo Taylor en capilares contempla una gran cantidad de factores que influyen en su comportamiento como la velocidad con la que ascienden las burbujas, la longitud de los segmentos de líquido y la caída de presión dentro del canal Liu et al. [8]. A medida que la miniaturización de dispositivos sigue avanzando y la dinámica de fluidos en microdispositivos se vuelve más relevante, es fundamental comprender cómo optimizar estos flujos para que sean lo más eficientes posible. Por otro lado, estudios previos han demostrado que factores como el tamaño del canal, la viscosidad del líquido y la tensión superficial pueden alterar significativamente la estabilidad y periodicidad del flujo Gupta et al. [9].

Los factores principales que influyen en el comportamiento del flujo tipo Taylor en capilares son Gupta et al. [9] y Kreutzer [10]:

- **Regímenes de flujo:** la forma del capilar, las propiedades físicas del sistema definen el flujo dentro del capilar y cómo este puede adoptar diferentes patrones.
- **Velocidad relativa de las fases:** la velocidad de cada fase tiene un impacto directo en la forma y en la estabilidad de las burbujas, como en el caso en el que la fase gaseosa

se mueve más rápido que la fase líquida, resultando en burbujas alargadas con movimientos circulares internos en la parte líquida. [11].

- **Efecto de confinamiento:** el reducido tamaño del capilar y la dinámica del flujo realizan la interacción con las paredes, provocando una distribución de fases no uniforme. Además, aumenta la relevancia de la tensión superficial y se favorece la formación de películas líquidas delgadas alrededor de las burbujas.
- **Número de Reynolds y régimen hidrodinámico:** en capilares predomina el régimen laminar (Re bajos), pero bajo ciertas condiciones pueden surgir inestabilidades que alteran la distribución de fases y la formación de burbujas.

En el capilar, la burbuja de gas no lo llena por completo; siempre queda una capa delgada de líquido entre la burbuja y la pared. De modo que el espesor de esta película depende de las fuerzas viscosas respecto a las de tensión superficial, y está representado por el número capilar (Ca). En general, un valor alto de Ca indica una reducción del espesor de la película.

Por otro lado, la transferencia de masa es igualmente relevante, especialmente en sistemas donde ocurren reacciones químicas o hay un intercambio de solutos entre fases. Este proceso ocurre debido a la difusión molecular que tiene lugar en la película líquida alrededor de la burbuja, lo que permite un transporte pasivo de especies químicas. Simultáneamente, la convección en el fluido interno se ve favorecida por la circulación dentro de los segmentos líquidos, creando zonas de mezcla activa que optimizan la transferencia de masa. Por lo anterior, es esencial entender el comportamiento del flujo de Taylor en su totalidad para poder predecir sus características en diversas condiciones de operación. Par la simulación de este tipo de flujo requiere establecer el modelo matemático que describan los fenómenos de transporte como la mecánica de fluidos, los fenómenos interfaciales, la transferencia de masa, las reacciones químicas y la transferencia de calor. Mediante estos modelos, es posible analizar el movimiento de las burbujas, la distribución de presiones y velocidades, y la influencia de parámetros clave como la tensión superficial y la viscosidad.

Metodología

El modelado matemático se base en la resolución de ecuaciones diferenciales parciales y algebraicas que rigen la dinámica de los fluidos, como las leyes de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía. Sin embargo, la complejidad del flujo multifásico en espacios confinados exige la aplicación de métodos numéricos y simplificaciones para poder obtener resultados viables.

El comportamiento del flujo de Taylor en capilares está establecido por medio del balance de momento, que describen el movimiento de los fluidos en términos de viscosidad, presión y fuerzas externas. Estas ecuaciones, en conjunto con la ecuación de continuidad y las condiciones en las interfaces, permiten modelar el comportamiento de las burbujas y los segmentos líquidos.

La ecuación de continuidad [12] expresa la conservación de la masa en un sistema fluido y se define como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

Para el caso de un fluido incompresible, en estado estacionario la ecuación se simplifica a:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (2)$$

lo que indica que el volumen del fluido se conserva a lo largo del flujo.

Mientras que las ecuaciones de cantidad de movimiento [12] describen el equilibrio de fuerzas en un fluido viscoso y se expresan como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho(\mathbf{u} \nabla \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu(\nabla^2 \mathbf{u}) + F \quad (3)$$

Donde ρ representa la densidad del fluido; el término $\mathbf{u}$ el campo de velocidades que describe la velocidad del fluido en cada punto del espacio; μ la viscosidad del fluido, p la presión, F fuerzas externas (gravedad, fuerzas interfaciales) y ∇ la divergencia del flujo de masa.

Para el caso específico del flujo de Taylor, la resolución de estas ecuaciones requiere considerar la interacción entre las fases líquida y gaseosa, lo cual introduce discontinuidades en la viscosidad y la densidad en la región interfacial. Dada la interacción dinámica entre las fases gaseosa y líquida en el flujo de Taylor, es imprescindible modelar la interfaz que las separa con alta precisión. Para lograr esto, se han desarrollado diversos métodos numéricos, incluido en [1], entre los cuales se encuentra el método de la función de nivel (Level-Set Method) cuya técnica numérica basada en la evolución de una función escalar entre dos fluidos $\phi(x, t)$ que representa la distancia de un punto del dominio hasta la interfaz entre dos fluidos. Esta función se define de manera que:

- $\phi > 0$: en la región ocupada por un fluido (por ejemplo, el líquido)
- $\phi < 0$: en la región ocupada por el otro fluido (por ejemplo, el gas),
- $\phi = 0$: indica la ubicación exacta de la interfaz entre ambos fluidos.

La ecuación temporal de esta función viene dada por la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (4)$$

Esta formulación permite capturar de forma natural los cambios topológicos de la interfaz, como su deformación, ruptura o fusión de burbujas.

Para preservar la propiedad de ϕ garantizar estabilidad numérica, se emplea una técnica de re-inicialización basada en la ecuación:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = S(\phi_o) (1 - |\nabla \phi|) \quad (5)$$

Donde τ es una variable de pseudo-tiempo que no corresponde formalmente al tiempo del sistema, sino que lo utiliza exclusivamente para estabilizar numéricamente la función de

nivel durante su reconfiguración. Este proceso se lleva a cabo en forma iterativa hasta que el gradiente de ϕ se aproxima a la unidad, es decir; $|\nabla\phi| \cong 1$, lo cual garantiza que actúe nuevamente como una distancia escalar.

La función $S(\phi_o)$ es una función de signo suavizada, derivada de la función de nivel original ϕ_o . Esta función indica en qué región del dominio se encuentra cada punto con respecto a la interfaz mencionada anteriormente en la función de nivel (Level-Set Method).

[1] emplea el método VOF que representa la fracción de volumen de fluido en cada celda de la malla. Se define una función de fracción de fluido $F(x, t)$ que varía entre 0 (gas) y 1 (líquido), y su evolución se rige por:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F = \quad (6)$$

Para reconstruir la interfaz, se emplean técnicas como el método PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation), donde la interfaz se representa mediante segmentos lineales en cada celda.

Condiciones de Tensión Superficial

La tensión superficial es clave en el flujo de Taylor, y se modela mediante la formulación de la fuerza de curvatura de Brackbill en VOF:

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma k \mathbf{n} \delta_s \quad (7)$$

donde σ es la tensión superficial, k es la curvatura de la interfaz, $\mathbf{n}$ es el vector normal δ_s es una función delta que define la interfaz.

En el método Level-Set la curvatura se calcula como:

$$k = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (8)$$

La ausencia de soluciones analíticas exactas para las ecuaciones que describen el flujo de Taylor, especialmente al considerar la tensión superficial, la interacción entre fases y la geometría confinada, hace necesario el uso de métodos numéricos para obtener soluciones aproximadas. Estos métodos permiten resolver las ecuaciones de cantidad de movimiento y de continuidad en un dominio computacional.

También es importante considerar la relación de longitud de burbuja a diámetro del capilar (L/D), ya que afecta a la recirculación dentro de los segmentos de líquido y la transferencia de masa y calor. Este parámetro se determina empíricamente y depende de las condiciones de operación del flujo.

$$\frac{L}{D} = f(Re, Ca, We) \quad (9)$$

El ángulo de contacto (θ) es otro parámetro a considerar, ya que define la interacción entre la fase líquida y la pared del capilar. La hidrofobicidad o hidrofiliidad del material afecta la forma y velocidad de las burbujas. En términos generales:

- Para un capilar hidrofóbico $\theta > 90^\circ$, las burbujas tienden a ser más largas y moverse con mayor velocidad.
- Para un capilar hidrofílico, $\theta < 90^\circ$, las burbujas pueden presentar una menor movilidad y mayor interacción con la pared.

La caída de presión a lo largo del capilar es un parámetro esencial en la simulación, ya que determina la velocidad del flujo y la estabilidad del patrón de burbujas. Se puede calcular usando la ecuación de Hagen-Poiseuille para flujo laminar:

$$\Delta P = \frac{32\mu u L}{D^2} \quad (10)$$

Para flujos bifásicos como el de Taylor, esta ecuación se modifica para incluir el efecto de la presencia de burbujas, generalmente mediante correlaciones empíricas. El comportamiento del flujo de Taylor en capilares depende de múltiples parámetros adimensionales y físicos, que determinan la formación, estabilidad y transporte de burbujas. La simulación numérica de este fenómeno requiere modelar adecuadamente estos factores mediante ecuaciones diferenciales parciales resueltas con métodos computacionales como FEM, FVM o FDM. El ajuste preciso de los parámetros clave es esencial para obtener resultados confiables y predecir la dinámica del sistema en aplicaciones industriales y científicas.

Geometría del sistema

El modelo consiste en un canal capilar de sección circular, caracterizado por un radio (R), a través del cual una fase líquida transporta burbujas de gas alargadas en dirección vertical ascendente. Para facilitar el análisis, adoptamos un marco de referencia que se desplaza conjuntamente con una de las burbujas. Esta elección permite representar el problema de manera bidimensional en coordenadas cilíndricas (r, z) o cartesianas (x, y) según la formulación numérica seleccionada.

Con el propósito de simplificar la resolución computacional, consideramos un dominio periódico que abarca una única burbuja y el líquido circundante. Esta aproximación se basa en la consideración de una distribución regular de burbujas, donde cada una posee dimensiones y espaciamiento idénticos.

Parámetros Geométricos Relevantes

A continuación, se detallan los parámetros geométricos clave que definen el sistema:

- H : Radio del capilar (m)
- L_b : Longitud de la burbuja de gas (m)
- L : Longitud de la celda periódica (m)
- δ : Espesor de la película líquida entre la burbuja y la pared del canal (m)

Propiedades físicas del sistema

El análisis se centra en un sistema bifásico compuesto por un líquido (agua) y un gas (aire). Dada la diferencia significativa en propiedades, restringimos nuestro estudio principalmente a la fase líquida, asumiendo que la viscosidad y la densidad del gas son despreciables en comparación.

Inicialmente, consideramos que las propiedades físicas de la fase líquida permanecen constantes a lo largo de la simulación. No obstante, reconocemos la importancia de explorar la influencia de posibles variaciones en estas propiedades, lo cual abordaremos cualitativamente en secciones posteriores.

Propiedades físicas de la fase líquida

Los parámetros que definen las propiedades físicas de la fase líquida son:

- μ : Viscosidad dinámica del líquido (1×10^{-3} Pa·s)
- ρ : Densidad del líquido (1000 kg/m^3)
- σ : Tensión superficial entre el líquido y el gas ($0,072 \text{ N/m}$)
- g : Aceleración gravitacional $9,81 \text{ m/s}^2$
- u : Velocidad de la burbuja $0,01 - 0,05 \text{ m/s}$
- H : Radio del capilar $0,5 \text{ mm}$

Nota: Los valores colocados de cada parámetro se ajustarán con las condiciones del sistema experimental en el modelado.

Variables del sistema

Para describir el comportamiento del sistema, definimos las siguientes variables independientes y dependientes:

Variables Independientes

Estas son las variables que controlan o definen el sistema, y que no dependen de otras variables dentro del modelo:

- (r, z) o (x, y) : coordenadas espaciales en el dominio bidimensional (m)
- t : tiempo (s). Si bien el sistema evoluciona con el tiempo, en nuestro marco de referencia (que se mueve con la burbuja) asumimos un régimen estacionario, formulando el modelo como cuasi-estático.

Variables Dependientes

Estas variables son el resultado de las interacciones dentro del sistema, y su valor se determina a partir de las variables independientes y las ecuaciones que describen el modelo:

- $\mathbf{u}(x, y) = (u_x, u_y)$: Campo de velocidades de la fase líquida (m/s). Este campo vectorial describe la velocidad del líquido en cada punto del dominio.
- $p(x, y)$: Campo de presión en la fase líquida (Pa). Este campo escalar representa la presión en cada punto del dominio.

Números adimensionales relevantes

Para analizar y comprender el régimen de flujo y el comportamiento de las interfaces en nuestro sistema, recurrimos al uso de números adimensionales clave, que nos permiten relacionar diferentes fuerzas y predecir el comportamiento del sistema:

Número de Reynolds (Re)

Este número nos indica la importancia relativa de las fuerzas inerciales (tendencia del fluido a seguir moviéndose) en comparación con las fuerzas viscosas (resistencia interna del fluido al flujo):

$$Re = \frac{\rho u D}{\mu} \quad (11)$$

En el régimen de flujo de Taylor el número de Reynolds tiene un flujo laminar ($Re < 100$); cuyas capas del fluido se deslizan suavemente unas sobre otras sin mezclarse entre sí.

Número de Capilaridad (Ca)

Este número indica qué la importancia de las fuerzas viscosas en comparación con las fuerzas de tensión superficial:

$$Ca = \frac{u \mu}{\sigma} \quad (12)$$

El término σ representa la tensión superficial. El número de capilaridad es fundamental para estimar el grosor de la película líquida que se forma entre la burbuja y la pared del canal. Para valores de $Ca < 0,01$, el modelo de Bretherton (1961) es una herramienta valiosa para predecir con precisión el grosor de esta película.

Número de Weber (We)

El número de Weber (We) establece la relación entre las fuerzas inerciales y las fuerzas de tensión superficial. En el estudio del flujo de Taylor en capilares, We adquiere una relevancia crítica para la caracterización de la deformación de las interfaces gas-líquido, así como para evaluar la estabilidad de las burbujas durante su desplazamiento a través del canal.

$$We = \frac{\rho u^2 L}{\sigma} \quad (13)$$

Donde en estos números adimensionales la u representa la velocidad característica del flujo (correspondiente a la velocidad de la burbuja o del flujo líquido), L es una longitud característica, σ representa la tensión superficial entre las fases, $D = H$ es el diámetro del capilar.

En el contexto del modelo presente, dado que las burbujas presentan una morfología alargada y se desplazan en un régimen de flujo laminar controlado, se anticipa un número de Weber significativamente menor a la unidad; lo cual, valida la omisión de fenómenos de ruptura de burbujas y deformaciones abruptas en la interfaz, reforzando así la pertinencia de un enfoque de modelado simplificado.

Consideraciones del modelo

- El flujo es laminar y bidimensional; es decir, variación en los ejes (r, z) en coordenadas cilíndricas y/o (x, y) en coordenadas rectangulares.
- El flujo es estacionario en un sistema de referencia que se mueve junto con la burbuja. Esto simplifica el análisis al eliminar la dependencia del tiempo.
- Las propiedades físicas de cada fase (líquido y gas) se mantienen constantes. El dominio es periódico, con burbujas de igual tamaño y separadas por una distancia constante.
- No consideraremos los efectos de la fase gaseosa. Esto significa que no resolveremos el campo de velocidad ni las ecuaciones para el gas.
- Las burbujas son lo suficientemente largas para permitir que se desarrolle un perfil de velocidad parabólico en la región intermedia del líquido.
- La tensión superficial actúa en la interfaz entre el líquido y el gas.

Planteamiento matemático

La estructura matemática que describe el comportamiento del flujo de Taylor dentro del capilar, contempla la distribución de velocidades y la presión en la fase líquida, de tal manera que permite simplificar el análisis al no considerar, en esta etapa, los efectos dinámicos de la fase gaseosa. Se supone que el flujo es laminar, estacionario y bidimensional, y lo observaremos desde un punto de referencia que se mueve junto con una de las burbujas.

Conservación de masa

Dado que se trabaja con un fluido incompresible, la ecuación de continuidad se expresa como:

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0 \quad (14)$$

Donde $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ representa el campo de velocidades de la fase líquida, expresado en coordenadas cartesianas. Esta ecuación nos asegura que la cantidad de fluido que entra en un volumen dado es igual a la cantidad que sale.

Conservación de cantidad de movimiento

Para describir el flujo laminar, la ecuación (3) se desprecia los efectos inerciales para flujo laminar (Reynolds bajo):

$$0 = -\nabla p + \mu(\nabla^2 \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \quad (15)$$

En coordenadas cartesianas se obtiene:

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) \quad (15a)$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) \quad (15b)$$

Se usaron coordenadas cartesianas porque el área de estudio tiene forma rectangular. La validez de estas aproximaciones se manifiesta en los resultados numéricos, los cuales muestran una distribución del campo de velocidades y presiones coherente con el comportamiento físico esperado en este tipo de flujo. [12]

Condición Interfacial: Tensión Superficial

En la interfaz donde se encuentran el gas y el líquido, se produce un salto de presión debido a la tensión superficial. Este fenómeno se describe mediante la Ley de Young-Laplace:

$$\Delta P = \sigma k \quad (16)$$

Este efecto es particularmente importante en los meniscos de la burbuja, donde se observa deformaciones tanto en el frente como en la extremidad.

Espesor de la Película Líquida

Un rasgo distintivo del flujo de Taylor es la formación de una película delgada de líquido entre la burbuja y la pared del canal. El espesor de esta película está relacionado con el número de Capilaridad, y se puede estimar utilizando la correlación empírica propuesta por [13]:

$$\frac{\delta}{R} = 1,34 Ca^{2/3} \quad (17)$$

Esta expresión permite incorporar los efectos de la viscosidad y la tensión superficial en la formación de la película, sin necesidad de resolver directamente la microescala de la capa delgada en el modelo.

Formulación adimensional

Para simplificar el análisis y facilitar la comparación con otros estudios, se adimensional las ecuaciones anteriores tomando en cuenta:

$$\bar{x} = \frac{x}{R} ; \bar{y} = \frac{y}{R} \quad (18)$$

$$\bar{u} = \frac{u}{U} \quad (19)$$

$$\bar{P} = \frac{P}{\mu U / R} \quad (20)$$

La expresión de cantidad de movimiento, en ausencia de inercia, adopta la siguiente forma:

$$0 = -\nabla \bar{P} + \nabla^2 \bar{u} \quad (21)$$

Esto reduce la cantidad de parámetros y permite a identificar los efectos dominantes en el flujo.

Representación esquemática del dominio

A continuación se presenta un esquema conceptual del dominio de simulación para una celda periódica de flujo tipo Taylor:

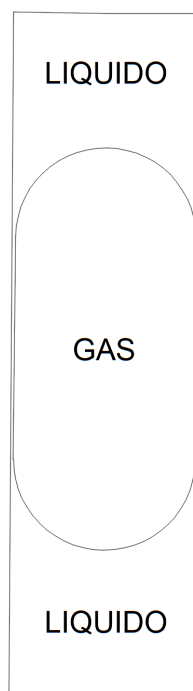


Figura 1: Dominio de las dos fases en el capilar

Definición de condiciones iniciales y de frontera

A continuación, se especifican las condiciones iniciales y de frontera requeridas para resolver el conjunto de ecuaciones que rigen el sistema, tal como se describió previamente. Estas condiciones son esenciales para simular con precisión el comportamiento hidrodinámico del flujo de Taylor en un capilar, dentro de un dominio representativo de una celda periódica. La formulación se basa en un modelo bidimensional, en régimen estacionario y en un marco de referencia que se mueve con la burbuja.

Condiciones Iniciales

Dado que el modelo se plantea en un régimen estacionario, la especificación de condiciones iniciales temporales, como en un análisis transitorio, no es estrictamente necesaria. Sin embargo, en una simulación numérica, se considera útil proporcionar un campo inicial aproximado de velocidad y presión para facilitar la convergencia del solucionador. En este caso, se puede emplear una condición inicial de velocidad parabolizada en la fase líquida, similar al perfil de Poiseuille para flujo laminar en un canal plano. Este campo inicial se expresa como:

$$u_x(y) = U_{\max} \left[1 - \left(\frac{2y}{H} \right)^2 \right] \quad (22)$$

Para la presión inicial, se puede asumir un gradiente lineal descendente en la dirección del flujo, acorde con la caída de presión característica de un fluido viscoso en movimiento.

Condiciones de Frontera

El dominio de simulación se representa como una celda periódica rectangular que contiene una única burbuja, rodeada por líquido y delimitada por las paredes del canal. Las condiciones de frontera aplicadas están diseñadas para reproducir el flujo periódico y capturar de manera precisa la interacción líquido-gas en las interfaces. A continuación, se describen las condiciones aplicadas en cada parte del dominio (véase la Figura 2).

A. Pared húmeda

Se aplica una condición de deslizamiento en las paredes del canal, lo que implica que la pared parece deslizarse en sentido opuesto al fluido:

$$\mathbf{u} = -\mathbf{u}_B \quad (23)$$

Esto refleja la interacción del fluido con la pared del capilar bajo una condición de deslizamiento, donde la velocidad del fluido en la interfaz con la pared es igual y opuesta a la velocidad de la burbuja, permitiendo el desarrollo del perfil de velocidad sin fricción viscosa en esa región.

B. Interfaz líquido-gas

En la región de contacto entre el gas y el líquido se imponen las siguientes condiciones:

- **Condición de velocidad:** La componente tangencial de la velocidad del líquido coincide con la velocidad de la burbuja. Dado que el dominio se mueve con la burbuja, esta

condición implica que el líquido fluye alrededor de una burbuja estacionaria. Se aplica una condición de pared móvil con velocidad opuesta al líquido.

- **Condición de tensión normal:** El salto de presión a través de la interfaz se relaciona con la tensión superficial, siguiendo la ley de Young-Laplace:

$$\Delta P = \sigma k \quad (24)$$

Esta condición se aplica directamente mediante la implementación de una fuerza capilar localizada en la interfaz, dependiendo del enfoque utilizado en el software de simulación (por ejemplo, el método Level Set o el método de seguimiento de frontera).

C. Entrada y salida del dominio

Dado que el sistema representa una celda periódica, se aplican condiciones de periodicidad para emular la secuencia de burbujas y celdas idénticas:

$$\mathbf{u}(0, y) = \mathbf{u}(L, y) \quad (25)$$

$$p(0, y) = p(L, y) + \Delta p \quad (26)$$

Donde:

- L : es la longitud de la celda periódica (longitud de la burbuja + longitud del espacio líquido entre burbujas)
- Δp : es la caída de presión media por celda

Estas condiciones aseguran que el flujo que sale por un extremo de la celda reaparece de forma idéntica por el otro, manteniendo la simetría y periodicidad del flujo de Taylor. A continuación, se presenta un esquema del dominio con las condiciones de frontera aplicadas (Figura 2):

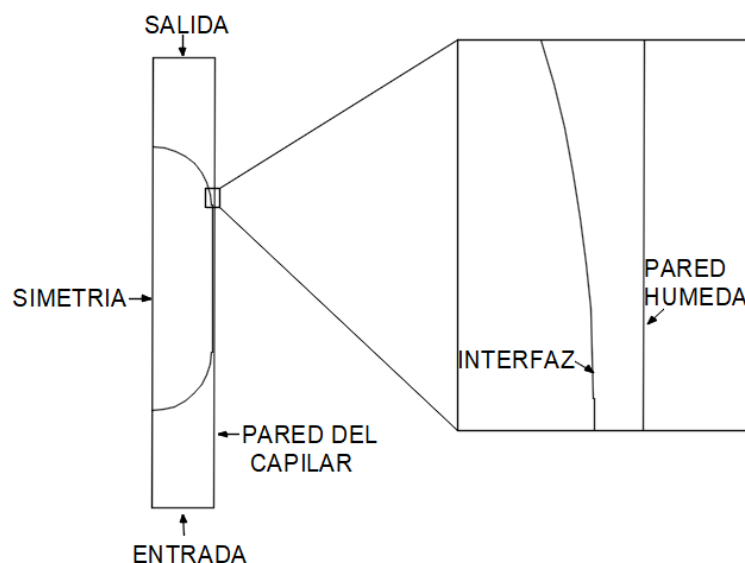


Figura 2: Esquema del dominio con las condiciones de frontera aplicadas.

Consideraciones Adicionales

- **Dominio móvil:** La implementación en un marco de referencia móvil facilita la simulación del flujo estacionario alrededor de una burbuja fija, simplificando el problema numérico.
- **Tensión superficial:** En los modelos numéricos, la tensión superficial se puede implementar como una fuerza distribuida (métodos de captura de interfaz como Level Set o Volume of Fluid).
- **Film líquido:** La película líquida que se forma entre la burbuja y la pared se representa de forma implícita mediante la resolución del perfil de velocidad y presión en dicha zona, sin necesidad de mallas extremadamente finas, gracias al uso de correlaciones como la de Bretherton.

Desarrollo de la Simulación Numérica

La simulación numérica se llevó a cabo utilizando el software [1] 6.2, aprovechando las capacidades del módulo de Flujo Laminar en 2D, conjuntamente con el método de malla estacionaria implementado en un marco de referencia móvil. El propósito fundamental de esta simulación es resolver de manera precisa proveniente de las ecuaciones de Navier-Stokes en el dominio previamente definido, considerando de forma integral los efectos inducidos por la tensión superficial, el confinamiento capilar, y la presencia periódica de burbujas de gas inmersas en una matriz líquida. En la presente sección, se detalla el procedimiento paso a paso que se siguió para la implementación del modelo, abarcando desde la construcción inicial del dominio geométrico hasta la obtención final de los resultados relevantes.

Construcción del Dominio Geométrico

En esta etapa, se diseñó un dominio bidimensional que representa una celda periódica del flujo tipo Taylor. El dominio se define como un rectángulo que contiene una burbuja de gas con una forma elíptica bien definida, la cual se encuentra centrada en el eje principal del canal.

Tabla 1: Parámetros Geométricos

Parámetro	Valor típico	Descripción
Altura del canal (H)	100 μm	Diámetro equivalente del capilar
Longitud de la celda (L)	800 μm	Longitud de la burbuja más el espacio líquido
Longitud de la celda (Lb)	500 μm	Aproximación al caso experimental típico
Radio de curvatura del menisco (R)	50 μm	Relación con la curvatura de la burbuja
Espesor de la película líquida (δ)	5 μm	separa la burbuja de las paredes del canal

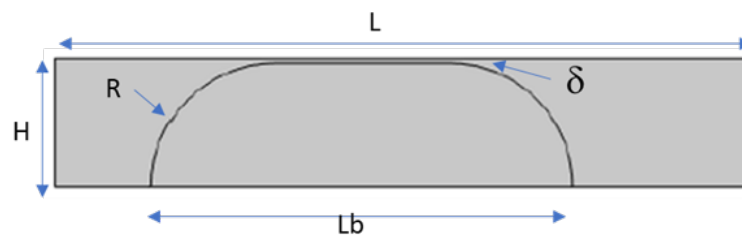


Figura 3: Geometría del Dominio 2D en COMSOL Multiphysics®

Configuración del Módulo Físico

El modelado numérico del flujo multifásico tipo Taylor en microcanales, se empleó el software [1] 6.2. El objetivo principal es reproducir y analizar el comportamiento dinámico de este tipo de flujo, caracterizado por la alternancia de burbujas de gas y tapones de líquido, con un enfoque particular en la geometría de los bulbos, el espesor de la película líquida, la distribución de velocidades internas y los efectos interfaciales dominantes.

Configuración del Modelo

Para optimizar la eficiencia computacional, sin sacrificar la precisión del modelo, el sistema físico se representó en un entorno 2D simétrico. Esta aproximación es particularmente adecuada para canales capilares circulares, ya que permite reducir significativamente el número de elementos necesarios para la discretización del dominio, minimizando así el gasto computacional asociado a la simulación.

La simulación se desarrolló utilizando la interfaz de física Flujo Multifásico – Flujo Bifásico, Conjunto de Nivel – Flujo Laminar, disponible en el módulo CFD (Computational Fluid Dynamics) de [1] 6.2. Esta combinación de interfaces permite simular el comportamiento de dos fases inmiscibles, típicamente gas y líquido, bajo condiciones de flujo laminar. La interfaz de Flujo Multifásico se encarga de resolver las ecuaciones de conservación de masa y momento para cada fase, mientras que la interfaz de Conjunto de Nivel (Level Set) se utiliza para rastrear la evolución de la interfaz entre las fases.

Método de Conjunto de Nivel (Level Set)

El método de conjunto de nivel (Level Set) es una técnica numérica ampliamente utilizada para rastrear la evolución de interfaces en flujos multifásicos. En este método, la interfaz entre las fases se representa mediante una función escalar ϕ , conocida como función de nivel, que varía continuamente entre 0 y 1 dentro del dominio. El valor $\phi = 0$ representa la fase líquida pura, $\phi = 1$ corresponde a la fase gaseosa pura, y los valores intermedios definen una zona difusa que representa la interfaz entre ambas fases.

La evolución temporal de esta interfaz está regida por una ecuación de advección acoplada con difusión artificial. La ecuación describe el transporte de la función de nivel debido al campo de velocidades del flujo, mientras que la difusión artificial se introduce para mantener un espesor de interfaz constante y controlado, evitando así las oscilaciones numéricas que pueden surgir debido a la discretización del dominio.

Las propiedades del sistema, como la densidad (ρ), la viscosidad dinámica (ν) y la tensión superficial (σ), se definieron como funciones del campo (ϕ), mediante una interpolación entre los valores correspondientes a cada fase. Esto garantiza una transición suave en la interfaz sin necesidad de una malla que se adapte específicamente a su contorno. Por ejemplo, la densidad efectiva se expresa como:

$$\rho_{\text{efectiva}} = \phi \cdot \rho_{\text{gas}} + (1 - \phi) \cdot \rho_{\text{líquido}} \quad (27)$$

De manera similar, la viscosidad efectiva y otros parámetros físicos relevantes se definen en función del valor local de ϕ . Este enfoque facilita el tratamiento numérico del sistema.

Flujo Laminar y la ecuación de cantidad de movimiento

El flujo se consideró laminar debido a los bajos valores del número de Reynolds característicos del sistema. Para ello, se empleó la ecuación de cantidad de movimiento para fluidos incomprensibles acopladas con la ecuación de conservación de masa. La resolución de este conjunto de ecuaciones permitió obtener el campo de velocidades y la distribución de presiones en todo el dominio:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (28)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (29)$$

Tensión Superficial y Fuerza de Cuerpo Continua (CSF)

El término de tensión superficial se incorporó mediante la formulación de fuerza de cuerpo continua (Continuum Surface Force, CSF), basada en el gradiente de ϕ . La curvatura local de la interfaz se calcula automáticamente por [1] a partir del gradiente normalizado y se aplica como una fuerza localizada en la región interfacial:

$$\mathbf{F}_{\text{tensión superficial}} = \sigma \cdot k \nabla \phi \quad (30)$$

la física real del flujo tipo Taylor, permite simular este tipo de fenómenos como la formación de la película líquida en las paredes del capilar y la estabilidad general del patrón bifásico.

Reparametrización de la Interfaz (Reinitialization)

Además, se habilitó el ajuste de reparametrización de la interfaz (reinitialization), que actúa periódicamente para preservar la forma deseada del perfil de ϕ sin difuminar excesivamente la interfaz. Esta reparametrización se controla mediante el parámetro ϵ (espesor de la interfaz difusa), el cual se ajustó en función del tamaño característico de malla y del tamaño esperado del canal.

El conjunto de estas configuraciones permitió construir un modelo robusto capaz de reproducir, de forma numérica, el comportamiento dinámico del flujo de Taylor, con especial énfasis en la geometría de los bulbos, el espesor de la película líquida, la distribución de velocidades internas y los efectos interfaciales dominantes. Este modelo proporciona una herramienta valiosa para comprender y optimizar el diseño de microdispositivos basados en el flujo de Taylor.

Definición de Condiciones de Frontera en [1]

Las condiciones de frontera que fueron definidas anteriormente, se traducen al lenguaje específico del software [1] de la siguiente manera:

Borde del Dominio	Condición Impuesta en [1]
Paredes superior e inferior	No deslizamiento ($u = 0$)
Interfaz burbuja-líquido	Condición de pared móvil ($u = -U_b$)
Entrada y salida	Condición periódica con caída de presión

Tabla 2: Condiciones de frontera implementadas en [1].

Para representar de manera precisa la interfaz entre el líquido y el gas, se utilizó una pared interior curva con condiciones personalizadas. Se implementó una condición de tensión superficial utilizando el módulo de "Multiphase Flow", o alternativamente, como una fuerza normal definida manualmente mediante la siguiente expresión:

$$\mathbf{f}_a = \sigma k \bar{\mathbf{n}} \quad (31)$$

Donde k representa la curvatura de la interfaz, la cual se calcula localmente en cada punto de la misma, y $\bar{\mathbf{n}}$ es el vector normal a la superficie.

Malla del Dominio

La malla utilizada para la discretización del dominio se caracterizó por ser estructurada y refinada de manera no uniforme. Se aplicó un mayor nivel de resolución cerca de la burbuja y en las proximidades de las paredes del canal, con el objetivo de capturar de forma precisa los gradientes de velocidad y el espesor de la película líquida que se forma en estas zonas.

Respecto al tipo de elementos finitos utilizados fue de la forma triangular alrededor de la interfaz líquido-gas para capturar la geometría curva con precisión. En la Figura 4 se observa el dominio del capilar con este mallado, así como un acercamiento para la interfaz líquido-gas.

Criterios de Mallado

- Relación de aspecto: Se procuró mantener una relación de aspecto menor a 5 para evitar elementos excesivamente alargados.

- **Tamaño mínimo de malla:** Se estableció un tamaño mínimo de malla de aproximadamente $1\ \mu\text{m}$ en las zonas críticas.
- **Independencia de malla:** Se realizó una verificación de independencia de malla para asegurar que los resultados no dependan significativamente del nivel de refinamiento.

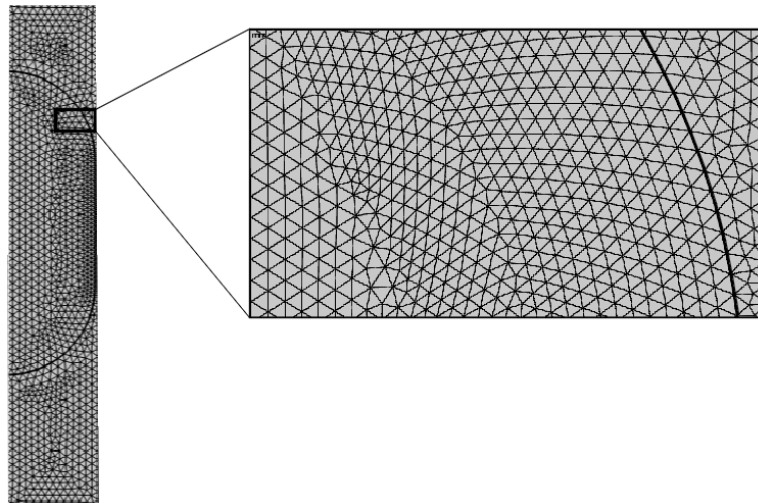


Figura 4: Malla determinada para el dominio del sistema

Solución del Modelo

Se empleó un solucionador estacionario del tipo segundo orden (P2+P1) para la velocidad y la presión, implementando una estabilización de tipo streamline diffusion para mejorar la convergencia en las zonas cercanas a la interfaz.

Parámetros del Solucionador

- **Tolerancia relativa:** Se fijó una tolerancia relativa de 10×10^{-6} para asegurar la precisión de la solución.
- **Método:** Para la solución numérica del modelo, se utilizó el método de diferenciación hacia atrás BDF (Backward Differentiation Formula), que es un esquema implícito adecuado para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales de naturaleza rígida. El método BDF es particularmente eficiente para problemas de dinámica de fluidos donde la estabilidad numérica es crucial, ya que permite manejar variaciones de velocidad y presión sin la restricción de pequeños pasos de tiempo que imponen los métodos explícitos. En [1], BDF es el método predeterminado para resolver ecuaciones transitorias debido a su capacidad para trabajar con pasos de tiempo adaptativos, optimizando la precisión y estabilidad de la simulación. En este caso, se utilizó con un esquema de órdenes variables, donde el software ajusta automáticamente el orden del método (de 1 a 5) para optimizar la convergencia y la eficiencia computacional.

- Pre-condicionado automático: Se habilitó el pre-condicionado automático para mejorar la convergencia del solucionador.
- Control adaptativo del paso: Se activó el control adaptativo del paso para ajustar dinámicamente el tamaño del paso de tiempo en función de la convergencia. La simulación convergió típicamente en un rango de 10 a 20 iteraciones, dependiendo del grado de refinamiento de la malla y las condiciones impuestas.

Validación Numérica Interna

Se realizó una verificación interna del modelo mediante el cálculo del número de Capilaridad simulado, utilizando la siguiente expresión del número de capilaridad, $C_a = \mu U / \sigma$, y la ecuación de Bretherton, $\delta/R = 1,34 C_a^{2/3}$, valida preliminarmente el comportamiento físico del modelo y su capacidad para capturar los fenómenos relevantes (Bretherton, 1961).

Exportación de Datos

Los resultados de la simulación se exportan en formatos compatibles con Excel para facilitar su posterior análisis y procesamiento. Los datos exportados incluyen:

- Curvas de presión en función de la posición a lo largo del canal.
- Perfiles de velocidad a diferentes alturas dentro del canal.
- Datos del espesor de la película líquida en función de la velocidad.

Evaluación y Validación del Modelo

La implementación de un modelo numérico destinado a representar el flujo tipo Taylor en capilares exige una evaluación rigurosa de su validez, confiabilidad y coherencia física inherente. En la presente sección, se establece de manera detallada la metodología que se emplea para validar el modelo propuesto, especificando con precisión qué resultados se espera observar, bajo qué fundamentos teóricos sólidos se basa dicha expectativa, y mediante qué criterios cuantitativos y cualitativos se valorará exhaustivamente el desempeño del modelo en cuestión. Se considera de suma importancia enfatizar que la validación aquí planteada no se fundamenta en la utilización de datos experimentales propios, sino que se apoya en comparaciones rigurosas con soluciones analíticas bien establecidas y correlaciones ampliamente reconocidas en la literatura científica especializada.

Objetivo de la Validación

El objetivo primordial de esta etapa crucial consiste en comprobar de manera fehaciente que el modelo numérico reproduce de forma precisa y fiel los fenómenos hidrodinámicos característicos del flujo bifásico tipo Taylor, respetando los supuestos establecidos de antemano y operando dentro del rango de condiciones físicas especificadas para el sistema en estudio. En particular, esta validación exhaustiva abarca:

- Forma y comportamiento de la burbuja: Se valida la forma y el comportamiento de la burbuja dentro del canal capilar, asegurando que se ajusten a las expectativas teóricas.
- Desarrollo de la película líquida: Se verifica el desarrollo de una película líquida delgada y estable que rodea a la burbuja, confirmando su existencia y estabilidad bajo las condiciones simuladas.
- Distribución de campos: Se evalúa la distribución del campo de velocidades y presiones en la fase líquida, comprobando que los patrones observados sean consistentes con las predicciones teóricas.
- Respuesta del modelo: Se analiza la respuesta coherente del modelo ante variaciones controladas de parámetros clave, tales como la viscosidad, la tensión superficial o la velocidad del flujo.

Supuestos y su Influencia en la Evaluación

Los siguientes supuestos fundamentales ejercen una influencia significativa en la forma en que el modelo será validado y actúan como un marco conceptual sólido para la interpretación de los resultados obtenidos. Estos supuestos, por lo tanto, deben tenerse en cuenta en todo momento:

Parámetros a Observar en la Validación

La validación rigurosa del modelo se enfocó en los siguientes aspectos cuantificables, los cuales proporcionan una base sólida para evaluar su desempeño:

- Espesor de la película líquida (δ): Una de las características más distintivas del flujo tipo Taylor es la formación de una película delgada de líquido que separa la burbuja de las paredes del canal. Este espesor está determinado por el equilibrio entre las fuerzas viscosas y capilares y se ha demostrado que sigue una relación empírica bien establecida con el número capilar, expresada por la ley de Bretherton (Bretherton, 1961):

Expectativa: Se espera que los valores de δ/R obtenidos numéricamente sigan de cerca esta ley, especialmente en el rango de $Ca < 0,1$, que corresponde al régimen clásico de flujo capilar dominado por los efectos interfaciales.

- Perfil de velocidad en la fase líquida: En la región entre burbujas, donde el flujo es puramente líquido y está completamente desarrollado, se espera un perfil de velocidad parabólico, característico del flujo de Poiseuille en microcanales.

Expectativa: El modelo debe reproducir esta forma en regiones alejadas de la burbuja. Cerca de la interfaz, el perfil puede distorsionarse debido a efectos de la curvatura y la tensión superficial, pero debe mantenerse estable y continuo.

- Campo de presión y salto interfacial. La burbuja debe generar una diferencia de presión entre su parte frontal y trasera, causado por la curvatura de la interfaz y modelada por la ley de Young-Laplace.

Expectativa: El modelo debe mostrar un salto de presión claramente identificable en el contorno de presión y un gradiente lineal en la región líquida, consistente con el flujo laminar desarrollado.

- Conservación de masa y cantidad de movimiento: El modelo debe conservar la masa en todo momento, es decir, el caudal de entrada debe igualar al caudal de salida y no debe existir acumulación artificial. Del mismo modo, las ecuaciones de Navier-Stokes deben resolverse de forma que el campo de velocidades y presiones sea físicamente coherente.

Expectativa: Se espera que el balance global de masa y momento se conserve, lo cual puede verificarse mediante herramientas de postproceso en [1] o mediante la integración del flujo en diferentes secciones del dominio.

Estrategia de Validación del Modelo

Una vez ejecutadas las simulaciones, se seguirán los siguientes pasos con el objetivo de validar el modelo propuesto:

- Cálculo del número capilar Ca con base en la velocidad de la burbuja y las propiedades del líquido.
- Comparación con datos experimentales y resultados para diversos números adimensionales.
- Análisis del contorno de presión, identificando el salto interfacial y el gradiente en la región líquida.
- Realización de estudios de sensibilidad, modificando parámetros como velocidad, diámetro y espesor para verificar la coherencia del modelo frente a variaciones.

Limitaciones Previstas en la Validación

Es importante reconocer y tener en cuenta las limitaciones que podrían surgir durante el proceso de validación:

- El modelo se basa en un dominio bidimensional, por lo que las comparaciones con resultados tridimensionales (experimentales o simulados) deben hacerse con precaución.
- La resolución numérica puede afectar la estimación de δ , especialmente cuando este valor es muy pequeño. Se deberán realizar pruebas de refinamiento de malla para mitigar este efecto.
- Las condiciones ideales del modelo, como el flujo perfectamente simétrico y las burbujas idénticas y espaciadas, pueden no reproducirse fielmente en sistemas experimentales reales, lo cual limita la comparación directa con datos experimentales.

Discusión de resultados

Se realizaron treinta y dos simulaciones en [1] versión 6.2, con el propósito de investigar el comportamiento característico del flujo de Taylor en el interior de conductos capilares. Las pruebas abarcaron un espectro diversificado de escenarios, definidos por variaciones en las condiciones geométricas del sistema, las propiedades físicas de los fluidos involucrados y las condiciones de frontera impuestas.

Con el objetivo de organizar y facilitar la interpretación de los datos obtenidos, las simulaciones fueron categorizadas bajo dos enfoques metodológicos primordiales: el primero, denominado condición de entrada fija ('E'), y el segundo, caracterizado por la implementación de condiciones de periodicidad ('CP'). Cada uno de estos enfoques fue sometido a una evaluación sistemática, explorando diversas combinaciones paramétricas. Específicamente, se manipularon los siguientes parámetros clave: el diámetro interno del capilar fue de 3 y 4 mm; el espesor de la película líquida que recubre la pared del capilar, ajustado a valores de 25 y 50 μm ; y, finalmente, la velocidad de flujo impuesta al sistema, que osciló entre 0.02 a 0.5 m/s. La combinación de estos parámetros permitió obtener una comprensión detallada de la influencia de cada uno en el comportamiento del flujo de Taylor.

El enfoque metodológico de entrada fija ('E') se fundamenta en la simulación de un flujo en desarrollo a partir del punto de acceso al capilar. Esta aproximación permite una observación detallada de la evolución hidrodinámica del sistema, con especial énfasis en las regiones iniciales donde la burbuja comienza su desplazamiento y se establece el perfil característico de la película líquida adyacente a la pared del conducto. La configuración 'E' resulta particularmente útil para capturar los fenómenos transitorios y las adaptaciones del flujo en las primeras etapas de su recorrido.

En contraste, el enfoque de condición periódica ('CP') se basa en la simulación de un dominio espacial reducido, el cual se replica de manera periódica a lo largo de la dirección del flujo. Esta estrategia es ideal para representar secciones del flujo donde ya se ha alcanzado un estado estabilizado, permitiendo un análisis eficiente de las características del flujo en régimen estacionario. La comparación directa entre los resultados obtenidos mediante los enfoques 'E' y 'CP' resulta fundamental para identificar las diferencias entre el desarrollo inicial del flujo y su comportamiento en condiciones de régimen establecido. Esta distinción es crucial para comprender la influencia de los efectos de entrada en la dinámica global del sistema.

Dentro del marco del análisis cuantitativo se evaluó tres números adimensionales de relevancia fundamental en el campo de la mecánica de fluidos: el número de Reynolds (Re), el número de Capilaridad (Ca) y el número de Weber (We). Estos parámetros adimensionales cumplen la función esencial de caracterizar el régimen de flujo predominante y las fuerzas dominantes que actúan en cada una de las simulaciones realizadas.

A continuación, se presenta la tabla con los valores calculados para cada condición:

Tabla 3: Números adimensionales calculados para cada simulación

Código de simulación	d (mm)	δ (μ m)	U (m/s)	Re	Ca	We
SIM R3MM - E25UM - U0.02	3	25	0.02	59.5	0.0140	0.0610
SIM R3MM - E25UM - U0.05	3	25	0.05	148.7	0.0350	0.3810
SIM R3MM - E25UM - U0.2	3	25	0.2	595.1	0.1400	6.1070
SIM R3MM - E25UM - U0.5	3	25	0.5	1487.70	0.3510	38.1680
SIM R3MM - E50UM - U0.02	3	50	0.02	59.5	0.0140	0.0610
SIM R3MM - E50UM - U0.05	3	50	0.05	148.7	0.0350	0.3810
SIM R3MM - E50UM - U0.2	3	50	0.2	595.1	0.1400	6.1070
SIM R3MM - E50UM - U0.5	3	50	0.5	1487.70	0.3510	38.1680
SIM R4MM - E25UM - U0.02	4	25	0.02	79.4	0.0190	0.1090
SIM R4MM - E25UM - U0.05	4	25	0.05	198.5	0.0490	0.6810
SIM R4MM - E25UM - U0.2	4	25	0.2	793.9	0.1970	10.8920
SIM R4MM - E25UM - U0.5	4	25	0.5	1984.90	0.4930	68.0750
SIM R4MM - E50UM - U0.02	4	50	0.02	79.4	0.0190	0.1090
SIM R4MM - E50UM - U0.05	4	50	0.05	198.5	0.0490	0.6810
SIM R4MM - E50UM - U0.2	4	50	0.2	793.9	0.1970	10.8920
SIM R4MM - E50UM - U0.5	4	50	0.5	1984.90	0.4930	68.0750

Análisis de tendencias respecto al enfoque de entrada

Enfoque de entrada fija E

Estas simulaciones implementadas bajo este enfoque de entrada fija, permiten observar detalladamente el desarrollo integral del flujo, desde su inicio de la entrada del capilar hasta la conformación de un perfil establecido.

En la figura 5 se presenta las simulaciones representativas de este enfoque identificadas como “SIM_R3MM - E25UM_U0.02”. Se aprecia la evolución de las regiones caracterizadas por la aceleración del fluido, así como la formación y el desarrollo de la película líquida que recubre la pared del conducto; además, revela con mayor claridad la existencia de gradientes de presión y velocidad a lo largo del eje del capilar, proporcionando información valiosa sobre la dinámica del flujo en su etapa de desarrollo.

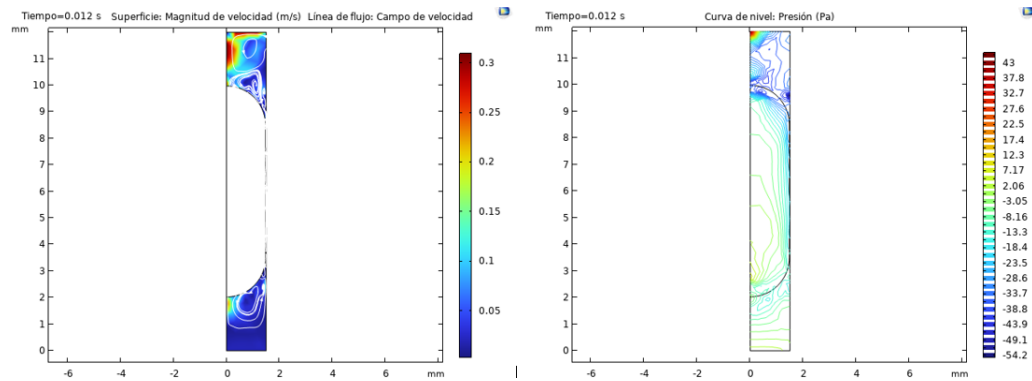


Figura 5: Resultados de la simulación SIMR3MM-E25UM-U02-E. Del lado izquierdo está el gráfico de velocidad, mientras el lado derecho corresponde a de presión.

Enfoque de entrada fija CP

En contraste, las simulaciones que emplean la condición periódica CP, ejemplificadas por el caso “SIM_R3MM - CP25_U0.02”, exhiben perfiles de flujo que se caracterizan por una mayor simetría y estabilidad. En estos escenarios la burbuja tiende a conservar su forma a lo largo del dominio simulado, y la película líquida presenta un espesor más uniforme. La condición de periodicidad impuesta favorece la convergencia hacia un estado estacionario, minimizando las fluctuaciones y los efectos transitorios observados en las simulaciones con entrada fija.

La Figura 5 muestra la simulación ‘E’ (velocidad de 0.02 m/s con un diámetro de 3 mm), donde el un campo de velocidades tiene un alto gradiente en la región delantera de la burbuja. Esta característica no se observa en la simulación correspondiente con condición periódica (‘CP’), donde se aprecia una distribución de velocidades más homogénea. Esta disparidad evidencia de manera concluyente que las condiciones de frontera impuestas ejercen un impacto directo y significativo sobre la estabilidad y la madurez del perfil de flujo, resaltando la importancia de la selección adecuada del enfoque metodológico en función de los objetivos del estudio.

Influencia del diámetro del capilar entre 3 mm y 4 mm

El análisis comparativo entre simulaciones realizadas con diámetros de capilar diferentes (3 y 4 mm) revela una clara influencia del tamaño del conducto en las características de flujo multifásico. Específicamente, se observa que, al incrementar el diámetro del capilar se produce un aumento en los valores de los números adimensionales de Reynolds (Re), Capilaridad (Ca) y Weber (We).

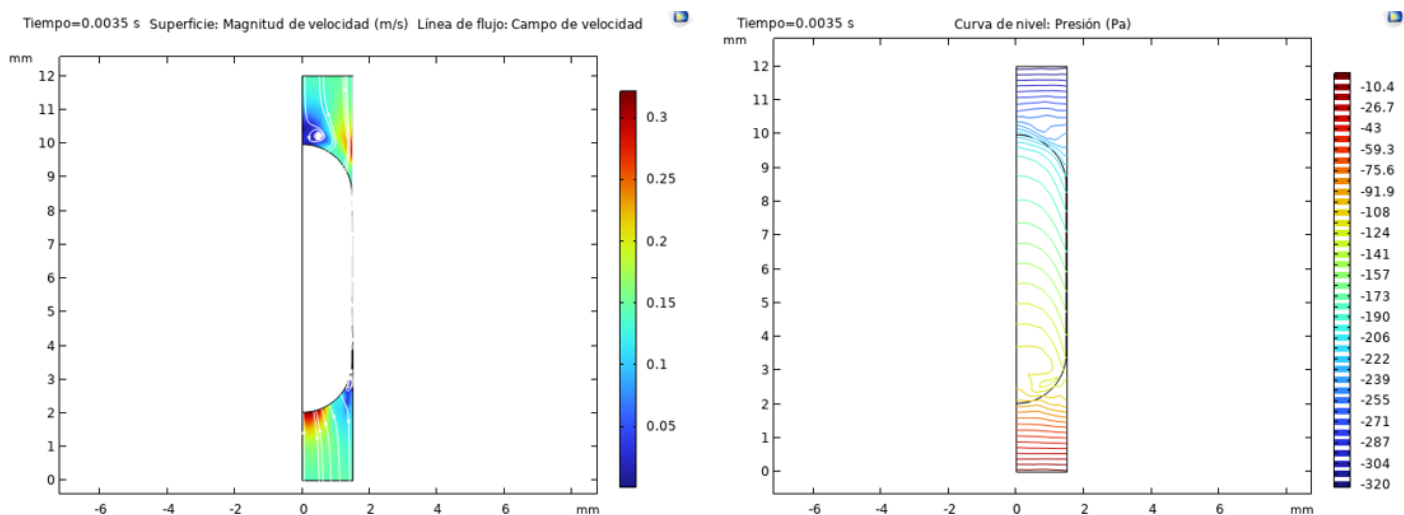


Figura 6: Resultados de la simulacion SIM R3MM - E25UM - U0.02 - CP.

De el lado izquierdo esta el grafico de velocidad, mientras que el del lado derecho es el grafico de presión.

Este incremento en los números adimensionales sugiere una transición hacia un régimen de flujo donde las fuerzas inerciales adquieren mayor preponderancia en relación con las fuerzas viscosas y de tensión superficial. En consecuencia, las burbujas tienden a experimen-

tar una mayor elongación en la dirección del flujo, y se observa un aumento en la velocidad máxima del fluido.

La evidencia de estos efectos se manifiesta visualmente en la Figura 7. En particular, se observa que la burbuja en los capilares de 4 mm de diámetro presenta una mayor extensión longitudinal respecto a capilares de 3 mm.

Adicionalmente, se identifican zonas de mayor velocidad en la película líquida que recubre la pared del capilar, siendo este fenómeno particularmente notorio en la simulación identificada como "SIM_R4MM - E25UM_U0.5". Estos hallazgos confirman que el incremento en el diámetro del capilar favorece un régimen de flujo más inercial, con una mayor deformación de las burbujas y una distribución de velocidades más heterogénea.

Influencia del espesor de película (25 μm vs 50 μm)

Si bien el análisis de los números adimensionales de Reynolds, Capilaridad y Weber no revela una variación significativa en función del espesor de la película líquida, el impacto físico de este parámetro en la dinámica del flujo multifásico es innegable y observable.

En particular, se aprecia que a menor espesor de la película líquida (25 μm), el fluido se ve compelido a fluir a través de un canal de menor sección transversal. Esta constricción impone la generación de mayores gradientes de presión y velocidad en la región circundante a la burbuja. En las simulaciones donde se implementa un espesor de película de 25 μm , como en el caso de "SIM_R3MM - CP25UM_U0.2", se evidencia la formación de zonas de alta presión en la región frontal de la burbuja, lo cual sugiere una mayor resistencia al avance de la misma.

En contraste, cuando el espesor de la película líquida se incrementa a 50 μm , como en la simulación "SIM_R3MM - CP50UM_U0.2", se observa que la película fluye de manera más suave y uniforme a lo largo de la pared del capilar. A mayor espesor de la película facilita el paso del fluido, reduciendo la resistencia viscosa que se opone al movimiento de la burbuja y disminuyendo, por ende, los gradientes de presión en la región interfacial.

Estos hallazgos demuestran que, aunque no presentan variaciones drásticas en los números adimensionales globales, el espesor de la película líquida modula significativamente la distribución local de presiones y velocidades en el sistema, afectando la dinámica del flujo multifásico.

Variación velocidad del flujo

La velocidad del flujo ejerce una influencia directa y significativa sobre los números adimensionales que caracterizan el comportamiento del sistema multifásico. En particular, se observa que el incremento de la velocidad de flujo impacta directamente sobre los valores de los números de Reynolds, Capilaridad y Weber.

A velocidades de flujo bajas ($u < 0,02$ m/s), tal como se evidencia en la simulación "SIM_R3MM - CP25UM - U0.02", se observa que la burbuja mantiene una forma bien definida y estable a lo largo de su trayectoria. En estas condiciones, el número de Weber (We) presenta valores significativamente menores a la unidad ($We \ll 1$), indica que las fuerzas de tensión

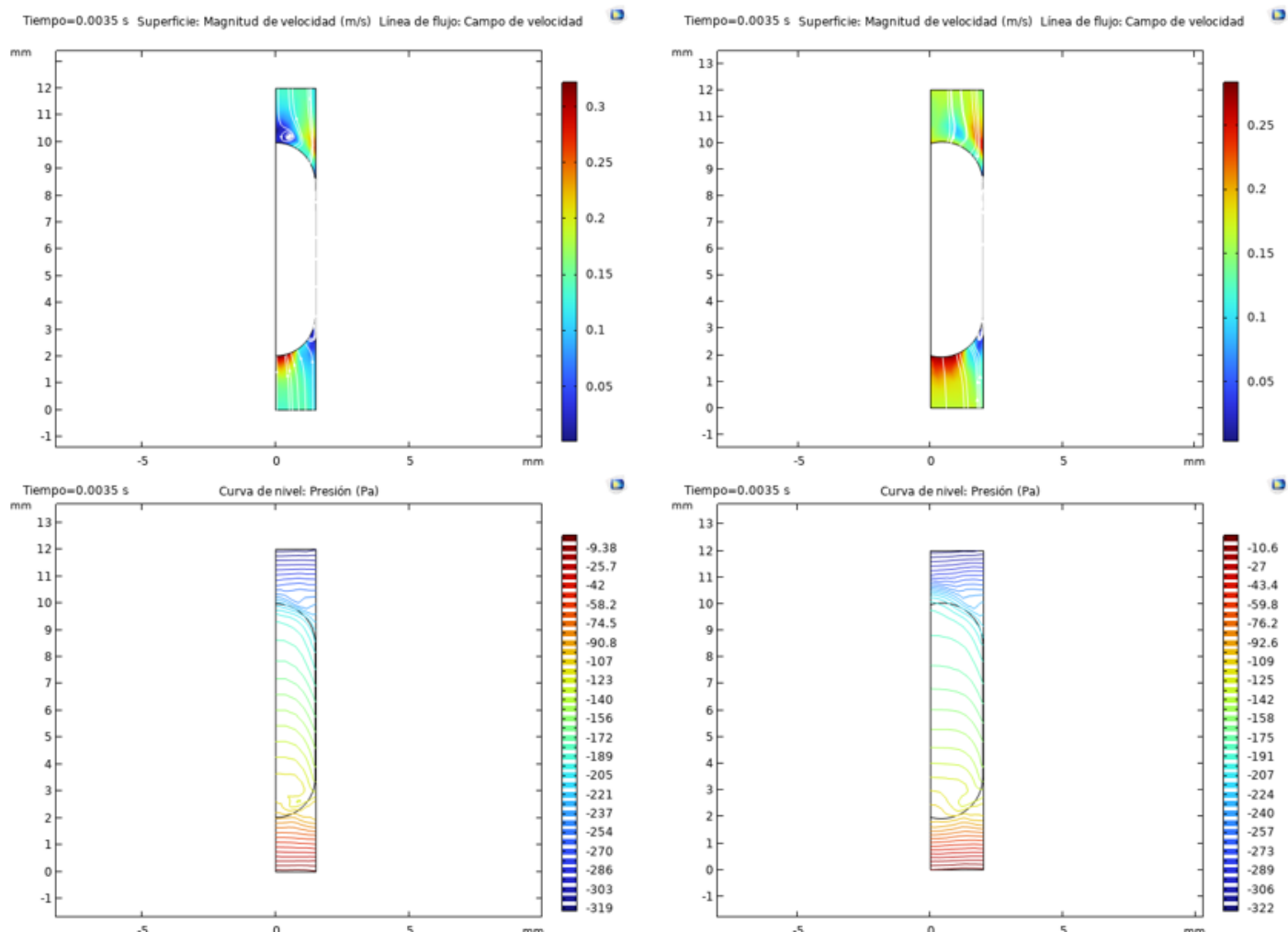


Figura 7: Comparación de resultados de la simulación SIM e25UM - U0.5 - CP con diámetros de 3 y 4 mm

De el lado izquierdo esta los graficos del capilar de 3mm, mientras que el del lado derecho son los graficos del capilar de 4mm

superficial dominan sobre las fuerzas inerciales y viscosas. En este régimen, la burbuja se mantiene cohesionada y la interfaz líquido-gas presenta una curvatura pronunciada.

En contraste, a velocidades de flujo elevadas ($u > 0,5$ m/s), tal como se observa en la Figura 9 en la simulación "SIM R4MM - CP25UM - U0.5", se aprecia una elongación significativa de la burbuja en la dirección del flujo, así como una mayor deformación del menisco que separa las fases fluidas. En estas condiciones, el número de Weber (We) alcanza valores superiores a 60 ($We > 60$), lo cual indica que las fuerzas inerciales dominan por completo sobre las fuerzas de tensión superficial. En este régimen, la burbuja se estira y deforma, adoptando una forma menos esférica y más alargada debido a la influencia de la inercia del fluido.

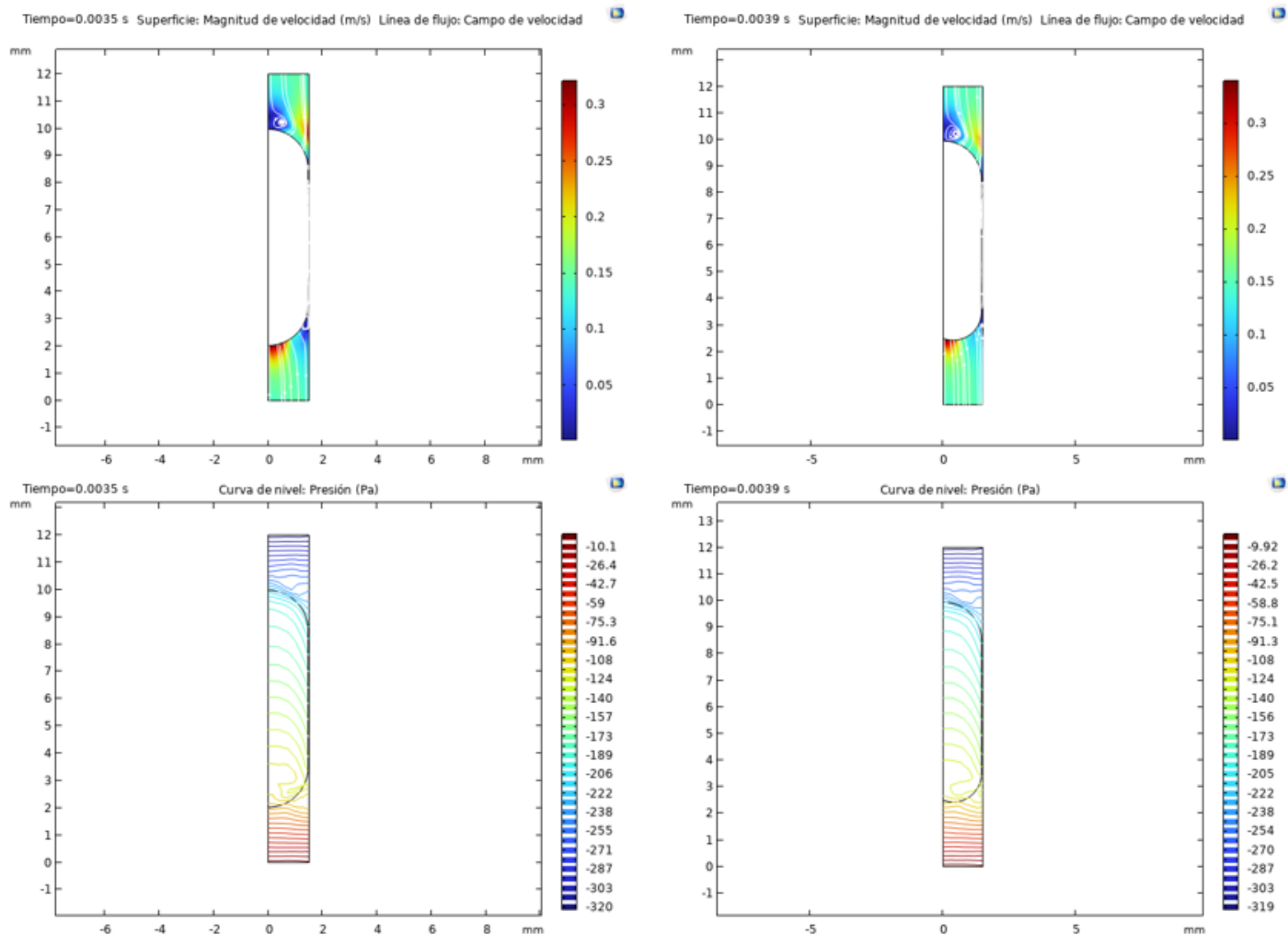


Figura 8: Comparación de resultados de la simulacion SIM R3 - U0.5 - CP con espesor de la película de 25 μm y 50 μm

De el lado izquierdo esta los graficos de de la película de 25 μm , mientras que el del lado derecho son los graficos de la película de 50 μm

Comparación con datos experimentales previos

El propósito de la presente sección radica en establecer una comparación entre los resultados numéricos obtenidos a través de las simulaciones multifásicas implementadas en [1] y los datos experimentales en la tesis titulada “Absorción de CO₂ en capilares” (Morales, 2020; Shao, 2010; Etminan, 2021). Esta confrontación metodológica tiene como objetivo primordial validar la pertinencia y la precisión del modelo de simulación propuesto, mediante la identificación de coincidencias o discrepancias relevantes entre los resultados numéricos y los datos empíricos. La comparación sistemática entre ambos conjuntos de datos permite profundizar en la comprensión de los fenómenos hidrodinámicos que caracterizan el flujo de Taylor en capilares de dimensiones microscópicas, y evaluar la capacidad del modelo numérico para reproducir con fidelidad el comportamiento observado en condiciones experimentales.

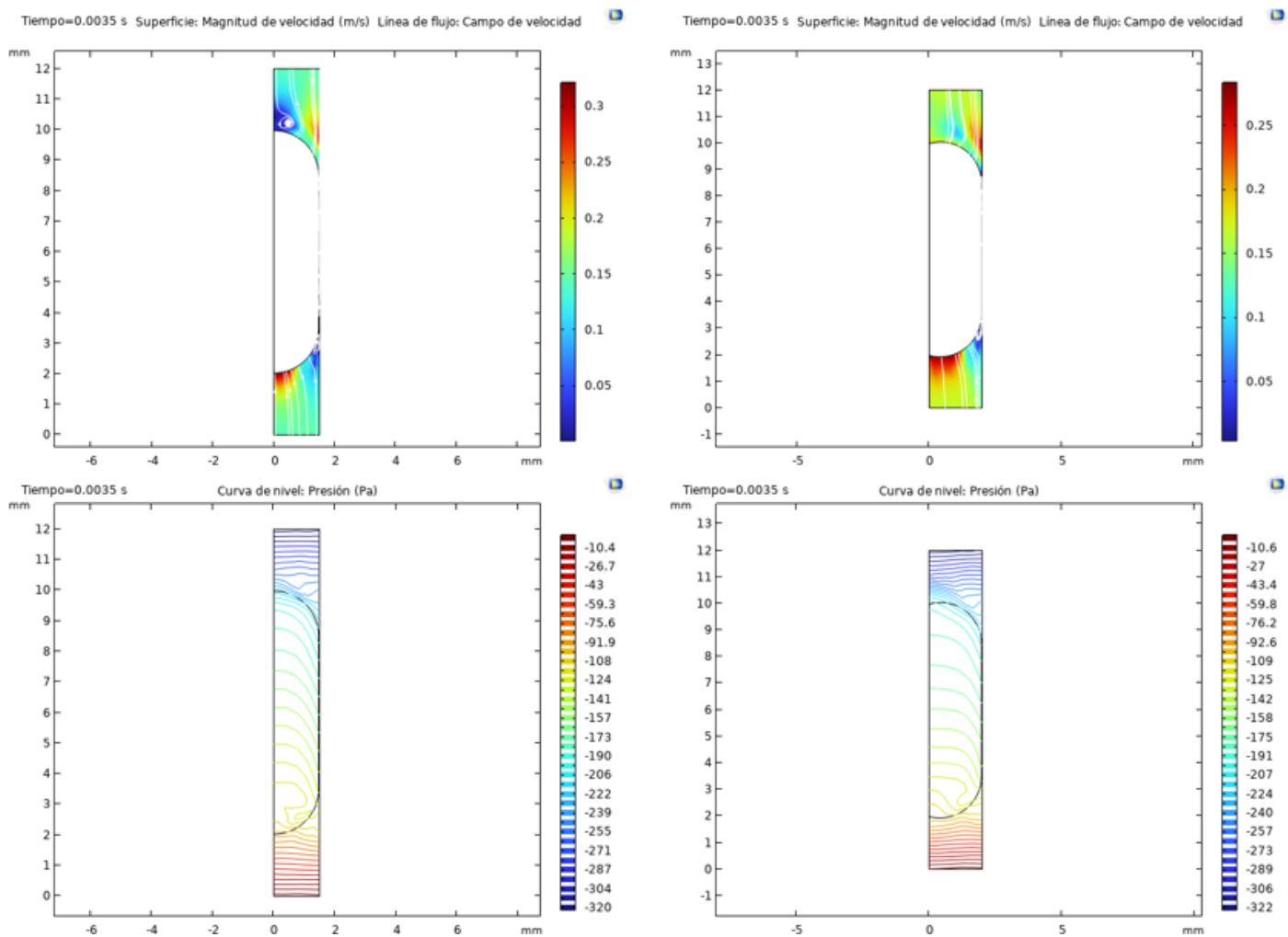


Figura 9: Comparación de resultados de la simulación SIM R3-4 E25UM - - CP con velocidades de 0.02 m/s y 0.5 m/s

De el lado izquierdo esta los graficos con velocidad de 0.02 m/s, mientras que el del lado derecho son los graficos con velocidad de 0.5 m/s

Velocidades de burbuja y concordancia cualitativa del régimen de flujo

El análisis de los datos experimentales reveló velocidades de ascenso de burbujas de Taylor de magnitud comparable a las obtenidas mediante simulaciones numéricas. Específicamente, se determinaron velocidades de $3,19 \times 10^{-2}$ m/s en capilares de 3 mm de diámetro y $1,61 \times 10^{-2}$ m/s en capilares de 4 mm de diámetro.

Es relevante destacar que estos valores experimentales se encuentran en un orden de magnitud similar a las velocidades obtenidas en las simulaciones realizadas con el software [1], particularmente bajo la condición de velocidad de entrada más baja considerada (0.02 m/s). Esta concordancia entre los resultados experimentales y las simulaciones representa un elemento fundamental para la validación del modelo numérico desarrollado.

Las simulaciones llevadas a cabo con una velocidad de entrada de 0.02 m/s exhibieron una notable estabilidad numérica, generando resultados que se consideran físicamente realistas tanto para las condiciones de entrada fija como para las condiciones periódicas. El aná-

lisis de la morfología del flujo, tal como se observa en las representaciones gráficas de la velocidad (ver la simulación SIM R3MM - E25UM - U0.02 -CP, Figura 6), revela un patrón característico de burbuja alargada, separada de la pared del capilar por una fina película de líquido. Esta morfología concuerda de manera notable con las observaciones experimentales directas obtenidas en el laboratorio a través de técnicas de visualización. Esta consistencia respalda la hipótesis de que el modelo numérico es capaz de replicar, al menos cualitativamente, el comportamiento del flujo tipo Taylor en condiciones que emulan de cerca las condiciones experimentales.

Comparación cuantitativa: Presión y velocidad del fluido

Durante la fase experimental, se registró una presión absoluta promedio de 1120.55 mmHg (149,322 Pa). En contraste, en las simulaciones numéricas implementadas bajo condiciones periódicas (CP), se impuso inicialmente un valor de presión de 525 Pa como condición de contorno. Sin embargo, se determinó que este valor era insuficiente para representar de manera precisa la influencia de la velocidad del flujo en las diversas configuraciones evaluadas. Al analizar la distribución de la presión a lo largo del capilar en las simulaciones, se constató que los valores obtenidos eran generalmente inferiores a los medidos experimentalmente.

Esta discrepancia fue particularmente notable en simulaciones que emplearon velocidades de flujo más bajas y en aquellas donde se formaron películas líquidas más delgadas. Esta diferencia entre los valores de presión simulados y experimentales puede atribuirse a la ausencia de ciertos fenómenos en el modelo numérico. Específicamente, el modelo no incorpora explícitamente los efectos de la absorción química ni otros procesos térmicos que sí están presentes en el sistema experimental. La omisión de estos factores reduce la resistencia al flujo dentro del modelo y, consecuentemente, disminuye la caída de presión calculada.

A pesar de las discrepancias cuantitativas, se observó una consistencia cualitativa en las tendencias. Tanto en las simulaciones como en los experimentos, se constató que un aumento en la velocidad de flujo y una disminución en el espesor de la película líquida resultaban en un incremento en la presión promedio a lo largo del dominio. Esta correlación entre los resultados simulados y experimentales sugiere que el modelo numérico captura de manera adecuada la física dominante del sistema, aunque aún no logra representar todos los factores que influyen en el comportamiento del flujo en el entorno experimental real.

Comparación de números adimensionales

La validación del modelo numérico se complementa mediante una comparación detallada de los números adimensionales calculados a partir de los resultados de las simulaciones con aquellos correspondientes a las condiciones experimentales. Esta evaluación permite verificar la consistencia entre los regímenes de flujo simulados y los observados en el laboratorio. A continuación, se presentan los valores aproximados de los números adimensionales estimados para los casos experimentales, utilizando los parámetros de velocidad de burbuja previamente reportados:

- Capilar de 3 mm: Número de Reynolds (Re) < 60, Número de Capilaridad (Ca) < 0,0105, y Número de Weber (We) < 0,094.
- Capilar de 4 mm: Número de Reynolds (Re) < 80, Número de Capilaridad (Ca) < 0,0053, y Número de Weber (We) < 0,039.

Al comparar estos valores con los obtenidos en las simulaciones (ver la Tabla 5), se observa que las pruebas realizadas con una velocidad de entrada de 0.02 m/s presentan los números adimensionales más cercanos a los casos experimentales. Por ejemplo, la simulación designada como SIM R4MM - E25UM - U0.02 - CP arrojó los siguientes resultados: $Re = 54.12$, $Ca = 0.00537$, y $We = 0.03768$. Estos valores muestran una concordancia notable con los resultados experimentales obtenidos para el capilar de 4 mm.

De manera similar, la simulación SIM R3MM - E25UM - U0.05 - E, con valores de $Re = 135.3$, $Ca = 0.01343$, y $We = 0.2356$, se aproxima a los resultados experimentales del capilar de 3 mm, aunque con una ligera sobre estimación en los valores de los números adimensionales.

Esta similitud en el rango de los números adimensionales proporciona una evidencia adicional de que los regímenes de flujo representados en las simulaciones son compatibles con los observados experimentalmente. En ambos casos, los flujos están predominantemente influenciados por fuerzas viscosas y de tensión superficial, características distintivas del régimen de flujo tipo Taylor, y en menor medida por fuerzas inerciales. Este hallazgo refuerza la validez física de los resultados obtenidos mediante las simulaciones numéricas.

Relevancia de las condiciones de frontera

Es importante señalar una diferencia fundamental entre el diseño experimental y la configuración de las simulaciones numéricas, específicamente en lo que respecta a las condiciones de frontera aplicadas. En el entorno experimental, el flujo se establece de manera natural como resultado de un gradiente de presión generado intrínsecamente en el sistema. En contraste, las simulaciones implementaron condiciones de frontera distintas: ya sea mediante la imposición de una velocidad de entrada fija 'E' o mediante la aplicación de una condición periódica 'CP' con presión constante.

Esta disparidad implica que las simulaciones que emplean la condición de entrada fija (E) reproducen de manera más fiel un escenario en el que el fluido se inyecta a una velocidad constante predeterminada. Por otro lado, las simulaciones que utilizan la condición periódica (CP) buscan emular un régimen de flujo completamente desarrollado, donde la distribución periódica de la presión reproduce ciclos repetitivos de fases de burbuja y líquido.

Ambas metodologías presentan ventajas inherentes, dependiendo del objetivo específico del análisis. La condición de entrada fija (E) proporciona un control directo sobre la velocidad del fluido, lo que permite estudiar su influencia en el perfil hidrodinámico del flujo. En contraste, la condición periódica (CP) facilita el análisis del comportamiento cíclico y repetitivo del flujo, y permite reducir el tamaño del dominio computacional sin comprometer la fidelidad del fenómeno físico modelado.

Identificación de condiciones óptimas de operación

Un objetivo primordial de este estudio es la identificación de las condiciones hidrodinámicas óptimas para el establecimiento de un flujo de tipo Taylor en configuración capilar. Para lograr este objetivo, se llevó a cabo un análisis exhaustivo de los resultados obtenidos a partir de 32 simulaciones multifásicas implementadas en el software [1]. La identificación de estas condiciones óptimas se basa en la evaluación integral de diversos parámetros, incluyendo el perfil de velocidad del fluido, la distribución de la presión, la morfología y estabilidad de las burbujas, y los valores de los números adimensionales relevantes, tales como el número de Reynolds (Re), el número de Capilaridad (Ca) y el número de Weber (We).

En el contexto de este estudio, las condiciones óptimas se definen como aquellas que permiten generar un patrón de flujo estable, caracterizado por una alternancia regular de burbujas y líquido, con la presencia de una película líquida continua que separa las burbujas de la pared del capilar, una distribución de presión uniforme a lo largo del sistema, y valores de los números adimensionales que sean coherentes con las características distintivas del régimen de flujo de Taylor.

Criterios para la Definición de Condiciones Óptimas

La identificación de las condiciones de operación óptimas se basó en los siguientes criterios fundamentales:

- Estabilidad y morfología del flujo de Taylor. El flujo debía exhibir la formación de burbujas alargadas, claramente definidas, con una película líquida continua que separa la burbuja de la pared del capilar. La interfaz entre las fases debía mantenerse intacta, sin rupturas ni deformaciones significativas.
- Distribución uniforme de la presión. Un gradiente de presión suave y progresivo a lo largo del dominio simulado indicaba un desarrollo hidrodinámico apropiado. Presiones excesivamente bajas o la presencia de picos abruptos en la distribución de presión se interpretaron como indicadores de inestabilidad o desequilibrio numérico.
- Números adimensionales en el rango esperado. Los valores del número de Reynolds debían permanecer dentro del régimen laminar ($Re < 200$), mientras que los números de Capilaridad y Weber debían reflejar la predominancia de las fuerzas de tensión superficial y viscosidad sobre las fuerzas inerciales, tal como se espera en microcanales que operan bajo el régimen de flujo tipo Taylor.
- Reproducibilidad con condiciones de frontera realistas: Las condiciones óptimas debían ser físicamente reproducibles, no únicamente estables en el contexto de la simulación numérica. En este sentido, se otorgó prioridad a las configuraciones implementadas bajo la condición de entrada fija (E) debido a su mayor similitud con los sistemas experimentales reales.

Combinaciones Óptimas: Diámetro, Espesor de Película y Velocidad

Con base en los criterios previamente definidos, se identificaron como condiciones óptimas aquellas simulaciones que cumplieran de manera simultánea con todos los criterios establecidos. En particular, las siguientes configuraciones se destacaron: capilar de 3 mm, espesor de película de 25 μm , velocidad de 0.02 m/s, condición de entrada fija (E):

- Simulación: SIM R3MM - E25UM - U0.02 – E
- Resultados destacados:
 - Flujo completamente desarrollado, con una burbuja bien formada y una película líquida continua.
 - Gradiente de presión suave y estable a lo largo del dominio.
 - Números Adimensionales: $Re = 54.12$, $Ca = 0.00537$, $We = 0.03768$ (régimen laminar dominado por la tensión superficial).
 - Excelente concordancia con datos experimentales reportados para el flujo de absorción de CO_2 .

Capilar de 4 mm, espesor de película de 50 μm , velocidad de 0.05 m/s, condición periódica (CP):

- Simulación: SIM R4MM - E50UM - U0.05 - CP
- Resultados destacados:
 - Flujo simétrico y periódico, con una forma de burbuja estable y una presión equilibrada.
 - Adecuado para estudios de transferencia repetitiva entre fases en un sistema simplificado.
 - Números Adimensionales: $Re = 95.17$, $Ca = 0.01174$, $We = 0.11713$ (régimen de Taylor controlado).
 - Recomendable para el modelado de larga duración debido a su eficiencia computacional bajo la condición periódica.

Capilar de 3 mm, Espesor de Película de 50 μm , Velocidad de 0.05 m/s, Condición de Entrada Fija (E):

- Simulación: SIM R3MM - E50UM - U0.05 - E
- Resultados destacados:
 - Formación de una burbuja continua y una película líquida más estable en comparación con el caso de 25 μm .
 - Números Adimensionales: $Re = 135.3$, $Ca = 0.01343$, $We = 0.2356$ (dentro del rango pero con una mayor velocidad de flujo sin comprometer la estabilidad).

Observaciones a otras condiciones de operación

En contraste, se identificaron ciertas condiciones que exhibieron inestabilidad o baja reproducibilidad:

Simulaciones con velocidades elevadas (0.5 m/s); mostraron una deformación significativa de la burbuja, una alta presión de salida y posibles errores numéricos en la región de la película líquida. Espesores de película de 25 μm en capilares de 4 mm; tendieron a romperse o desaparecer en zonas críticas, especialmente bajo la condición periódica (CP). Aunque estas condiciones pueden ser útiles para el análisis de los límites de operación, no se recomiendan como óptimas debido a su alto requerimiento energético, inestabilidad numérica o dificultad de replicación experimental.

Síntesis de condiciones óptimas

Las condiciones óptimas identificadas se resumen en la siguiente tabla:

Tabla 4: Resumen de condiciones óptimas de operación observadas en las simulaciones.

Condición	V (m/s)	D (mm)	ε (μm)	Re	Ca	We	Comportamiento Observado
CP	0.05	3	50	146.69	0.0086	0.3654	Burbuja estable, presión suave
E	0.02	3	50	58.68	0.0034	0.0585	Flujo uniforme, sin ruptura de película
CP	0.2	4	25	270.58	0.0207	1.4578	Perfil de velocidad simétrico
CP	0.05	4	50	190.08	0.0086	0.6632	Menor gradiente de presión axial
E	0.02	4	25	87.86	0.0034	0.0878	Flujo controlado, bajo arrastre

En conclusión, las simulaciones numéricas han permitido identificar con claridad un conjunto de configuraciones que maximizan la estabilidad del flujo de Taylor, la continuidad de la película líquida y la compatibilidad con las condiciones experimentales reales. Estas condiciones serán fundamentales para el análisis de la transferencia de masa y energía en futuras etapas del proyecto.

Evaluación de estrategias de control y optimización

Una vez determinadas las condiciones hidrodinámicas óptimas para el establecimiento de un flujo de Taylor estable en capilares, se torna fundamental analizar posibles estrategias de control y optimización que garanticen una operación eficiente y reproducible del sistema. Este apartado integra los hallazgos derivados de las 32 simulaciones realizadas, los números adimensionales calculados, las comparaciones con datos experimentales, y los efectos observados de los diversos parámetros geométricos y de operación, incluyendo el diámetro del capilar, el espesor de la película líquida y la velocidad del flujo.

Control del régimen de flujo respecto al Número de Reynolds

Uno de los aspectos más relevantes en la operación de este sistema multifásico es el control del régimen de flujo, el cual está intrínsecamente relacionado con el número de Reynolds

(Re). Tal como se demostró anterior, todas las simulaciones fueron llevadas a cabo en un rango de Re inferior a 300, lo que garantiza un comportamiento de flujo laminar. No obstante, se observaron diferencias significativas entre las distintas configuraciones:

- Simulaciones con velocidades de flujo bajas (0.02 m/s) presentaron valores de Re entre 54 y 70, lo que favorece un flujo estable, caracterizado por interfaces suaves y una burbuja con una geometría regular.
- A medida que la velocidad del flujo se incrementaba a 0.2 o 0.5 m/s, el valor de Re ascendía a valores cercanos a 400, lo que inducía deformaciones en la interfaz y aumentaba el riesgo de ruptura de la película líquida.
- Estrategia de Control Propuesta: Se propone mantener la velocidad del flujo dentro del rango de 0.02 a 0.05 m/s, de modo que el valor de Re se mantenga en el intervalo de 50 a 140, el cual se asocia con condiciones ideales para la formación del flujo de Taylor. Este control puede ser implementado mediante el uso de válvulas reguladoras de flujo o mediante controladores de presión en la entrada del sistema.

Regulación del Espesor de la Película Líquida

El espesor de la película líquida que se forma entre la burbuja y la pared del capilar es un parámetro clave, ya que influye directamente en la transferencia de masa, en la caída de presión y en la estabilidad global del sistema. En este estudio, se evaluaron espesores de película de 25 μm y 50 μm . Los resultados obtenidos permiten extraer las siguientes conclusiones relevantes:

- Con un espesor de 25 μm , se obtiene una mayor resistencia viscosa, lo que puede favorecer la absorción en la película líquida, pero también incrementa la caída de presión a lo largo del sistema. Adicionalmente, en algunas configuraciones (diámetro de 4 mm, velocidad de 0.5 m/s), se observó la ruptura de la película.
- Con un espesor de 50 μm , la película líquida exhibe una mayor estabilidad ante las variaciones en la velocidad del flujo, pero reduce el área efectiva de contacto entre las fases líquida y gaseosa, lo que podría limitar la eficiencia en procesos tales como la absorción de CO₂.
- Estrategia de optimización: Se propone utilizar espesores de película intermedios, dentro del rango de 30 a 40 μm , cuando se desee optimizar simultáneamente la estabilidad del flujo y la eficiencia de transferencia de masa. Si bien no fueron evaluadas directamente en este estudio, la tendencia observada sugiere que este rango de espesores puede representar un punto de compromiso efectivo.

El diámetro del capilar tuvo un efecto significativo en el comportamiento del flujo:

- Con capilares de 3 mm de diámetro, se obtuvo un mayor control sobre la forma de la burbuja y se observó una caída de presión más lineal a lo largo del dominio. Este

diámetro favorece el establecimiento de un régimen de flujo estable, incluso a bajas velocidades.

- En capilares de 4 mm de diámetro, la formación del flujo de Taylor también fue posible, pero requirió ajustes más precisos en la velocidad del flujo y en el espesor de la película líquida para evitar la formación de zonas de recirculación y la pérdida de simetría en el flujo.
- Estrategia de diseño recomendada: Se recomienda preferir el uso de capilares de 3 mm de diámetro para sistemas experimentales o aquellos que sean sensibles a las variaciones en los parámetros de operación. Para aplicaciones a escala industrial o para aquellas que requieran un mayor caudal, pueden utilizarse capilares de 4 mm de diámetro, siempre y cuando se controle cuidadosamente el resto de los parámetros de operación.

Elección de la Condición de Frontera (E vs CP)

Se evaluaron dos tipos de condiciones de frontera en las simulaciones:

- Condición de Entrada Fija (E): Permite reproducir con mayor fidelidad la formación de la burbuja y la evolución del flujo desde su inicio. Esta condición es la más adecuada para la simulación de sistemas reales, tales como reactores o micro absorbedores.
- Condición Periódica (CP): Simula una celda repetitiva del flujo, lo que la hace ideal para estudios del comportamiento cíclico del flujo o para reducir el tamaño del dominio computacional. Sin embargo, esta condición no representa la evolución dinámica del frente de la burbuja.
- Estrategia de modelado numérico: Se recomienda utilizar la condición de entrada fija (E) para estudios de la formación y el desarrollo del flujo de Taylor, y la condición periódica (CP) para análisis de largo plazo o para el estudio de la transferencia de masa y energía en estado periódico.

Evaluación Integral: We y Ca como indicadores de control

Además del número de Reynolds, los números de Weber (We) y de Capilaridad (Ca) ofrecieron información valiosa sobre el balance de fuerzas en cada simulación:

- Valores bajos del número de Weber ($We < 0,25$) se asociaron con la estabilidad de la interfaz y la ausencia de fenómenos de ruptura.
- Valores del número de Capilaridad $Ca < 0,02$ fueron consistentes con la presencia de una película líquida continua y una burbuja elongada, especialmente en simulaciones con velocidades de flujo menores o iguales a 0.05 m/s.
- Estrategia de Monitoreo: Se recomienda calcular y mantener los valores de Ca y We dentro de estos rangos operativos como un criterio de validación numérica y física de cada configuración simulada.

En conclusión, las estrategias de control y optimización derivadas de este análisis permiten no solo garantizar la estabilidad del flujo de Taylor en capilares, sino también facilitar su diseño e implementación en aplicaciones reales, tales como reactores de absorción de gases. La integración de criterios geométricos, hidrodinámicos y numéricos garantiza una aproximación sólida y replicable, capaz de adaptarse a distintos escenarios experimentales e industriales.

Conclusiones

El presente trabajo se centró en el desarrollo y análisis de un modelo de simulación para el estudio de la hidrodinámica del flujo de Taylor en capilares, utilizando el software Comsol Multiphysics® 6.2, específicamente el módulo de flujo multifásico (flujo bifásico con conjunto de nivel). Se realizaron un total de 32 simulaciones, implementando variaciones controladas en los siguientes parámetros: diámetro del capilar (3 mm y 4 mm), espesor de la película líquida (25 μm y 50 μm), velocidad del flujo (0.02, 0.05, 0.2 y 0.5 m/s) y tipo de condición de frontera (entrada fija y condición periódica). A partir del análisis se derivaron las siguientes conclusiones generales:

- Se logró replicar con una precisión la estructura característica del flujo de Taylor: una burbuja alargada, separada de la pared del capilar por una película líquida delgada. Se constató que la geometría y el comportamiento de esta configuración son altamente sensibles tanto a las condiciones de frontera como a los parámetros físicos del sistema.
- Las condiciones de entrada fija (E) permitieron observar la evolución natural del flujo y la formación de la burbuja, lo que las convierte en una representación más fiel de los procesos reales. Por otra parte, con condiciones periódicas (CP) se facilitó el análisis del comportamiento repetitivo del flujo en un dominio reducido, lo cual resulta particularmente útil para estudios en estado estacionario.
- Las velocidades de bajo flujo ($< 0,02$ m/s) favorecen la formación de burbujas más estables, con interfaces bien definidas y una película líquida continua. En contraste, las velocidades altas de flujo (0.5 m/s) generan deformaciones en las burbujas, pérdida de simetría y un mayor riesgo de ruptura de la película líquida.
- El espesor de la película líquida juega un papel determinante en la estabilidad del flujo. Las películas líquidas con un espesor de 50 μm exhibieron una mayor resistencia ante las perturbaciones hidrodinámicas, pero redujeron el área efectiva de contacto entre las fases. Por otro lado, las películas de 25 μm ofrecieron una mayor eficiencia de transferencia, pero con un mayor riesgo de inestabilidad.
- El diámetro del capilar también ejerce una influencia significativa en el comportamiento del flujo: los capilares con un diámetro de 3mm facilitaron un mayor control del flujo, una menor caída de presión y la formación de burbujas más largas. En contraste, los capilares con un diámetro de 4mm presentaron una mayor variabilidad en el comportamiento del flujo.

- La comparación entre las simulaciones y datos experimentales reportados en la literatura reveló una buena concordancia cualitativa en la forma de la burbuja respecto al espesor de la película líquida y la distribución de velocidades, lo cual valida el enfoque numérico implementado.
- Se demostró que los números adimensionales de Reynolds, Capilaridad y Weber son herramientas clave para la caracterización del régimen de flujo. Se identificó que los valores de $Re < 150$, $Ca < 0,02$ y $We < 0,25$ están asociados con configuraciones estables del flujo de Taylor.
- En conjunto, estos resultados confirman que el modelo propuesto no solo permite visualizar con una alta fidelidad el comportamiento del flujo multifásico, sino que también proporciona una base sólida para el diseño y control de sistemas que operan en el régimen de flujo de Taylor, tales como micro-reactores, absorbedores capilares e intercambiadores de calor multifásicos.

Impacto y aplicaciones del estudio

El presente estudio trasciende el ámbito de la contribución académica al entendimiento numérico del flujo de Taylor, al poseer un marcado componente aplicado con implicaciones directas en diversos campos de la ingeniería química, farmacéutica y ambiental. Entre los impactos más relevantes, destacan:

- Validación y predicción del comportamiento del flujo multifásico: El modelo desarrollado facilita la predicción confiable del comportamiento de burbujas en canales capilares, reduciendo la necesidad de pruebas experimentales exhaustivas en las fases iniciales del diseño.
- Optimización de dispositivos de transferencia de masa: El flujo de Taylor se emplea en procesos que buscan maximizar la eficiencia de absorción o reacción, tales como la absorción de CO_2 , reactores gas-líquido o microfluídica. La caracterización detallada de los parámetros óptimos obtenida en este trabajo puede aprovecharse para diseñar dispositivos más eficientes.
- Base para estrategias de escalamiento: El estudio aporta herramientas y criterios para escalar este tipo de flujo desde condiciones de laboratorio hacia aplicaciones a mayor escala, lo cual resulta crucial en el desarrollo de procesos industriales sostenibles.
- Contribución a la modelación numérica de flujos multifásicos: Se evidencia el potencial de [1] como plataforma para el modelado de fenómenos multifásicos complejos. El enfoque empleado puede extenderse a otros sistemas de flujo en microcanales, e incluso a configuraciones no capilares.
- Referencia para futuras Investigaciones: Este trabajo puede servir como punto de partida para investigaciones más profundas, incluyendo, por ejemplo, transferencia de masa o energía, reacciones químicas en la fase líquida y la optimización de geometrías no cilíndricas.

En conclusión, el impacto del estudio se manifiesta tanto en el avance del conocimiento sobre la dinámica del flujo de Taylor como en la posibilidad tangible de aplicar dicho conocimiento en el diseño, control y optimización de sistemas multifásicos altamente eficientes y sostenibles.

Direcciones de correo de los autores

NATIVIDAD-RANGEL, R. : Facultad de Química, Universidad Autónoma del Estado de México, Campus El Cerrillo, Piedras Blancas.

rnatividadr@uaemex.mx

RAMÍREZ-SERRANO, A.* : Facultad de Química, Universidad Autónoma del Estado de México, Campus El Cerrillo, Piedras Blancas.

aramirezs@uaemex.mx

ROMERO-ROMERO, R. : Facultad de Química, Universidad Autónoma del Estado de México, Campus El Cerrillo, Piedras Blancas.

rromeror@uaemex.mx

HERNÁNDEZ-SERVÍN, J. A. : Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de México, Cerro de Coatepec, Ciudad Universitaria, 50110, Toluca, Estado de México.

joseph_servin@uaemex.mx

Referencias

- [1] COMSOL Multiphysics®, *COMSOL Multiphysics® v6.2 Documentation*, Accessed: 2026-03-31, 2024. dirección: <https://www.comsol.com/documentation>
- [2] N. Fishwick, W. Kulkarni McGuire, Winterbotton y Stitt, «Selective hydrogenation reactions: A comparative study of monolith CDC, stirred tank and trickle bed reactors,» *Science Direct*, vol. 128, n.º 1, págs. 108-114, 2007.
- [3] H. Natividad, C. Escobar y Romero, «Multiphase photo-capillary reactors coated with TiO₂ films: Preparation, characterization and photocatalytic performance,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 1, n.º 304, págs. 19-47, 2016.
- [4] Peña, A. Romero y Natividad, «Cu/TiO₂ Photo-catalyzed CO₂ Chemical Reduction in a Multiphase Capillary Reactor,» *Chemistry Environmental Science, Engineering*, vol. 67, n.º 5-8, págs. 1-17, 2023.
- [5] F. D. Martínez, A. Billet, C. Julcour-Lebigue y F. Larachi, «Hydrodynamics And Mass Transfer In Taylor Flow,» 2015.
- [6] R. S. Abiev, «Gas-liquid and gas-liquid-solid mass transfer model for Taylor flow in micro (milli) channels: A theoretical approach and experimental proof,» *Chemical Engineering Journal Advances*, vol. 4, pág. 100 065, 2020.
- [7] C. Butler, E. Cid, A.-M. Billet y B. Lalanne, «Numerical simulation of mass transfer dynamics in Taylor flows,» *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 179, pág. 121 670, 2021.

- [8] H. Liu, C. O. Vandu y R. Krishna, «Hydrodynamics of Taylor flow in vertical capillaries: flow regimes, bubble rise velocity, liquid slug length, and pressure drop,» *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 44, n.º 14, págs. 4884-4897, 2005.
- [9] R. Gupta, D. F. Fletcher y B. S. Haynes, «On the CFD modelling of Taylor flow in microchannels,» *Chemical Engineering Science*, vol. 64, n.º 12, págs. 2941-2950, 2009.
- [10] M. T. Kreutzer, «Hydrodynamics of Taylor flow in capillaries and monolith reactors,» 2003.
- [11] T. Thulasidas, M. A. Abraham y R. L. Cerro, «Flow patterns in liquid slugs during bubble-train flow inside capillaries,» *Chemical engineering science*, vol. 52, n.º 17, págs. 2947-2962, 1997.
- [12] R. Bird, W. Stewart y E. Lightfoot, *Fenómenos de transporte*. Reverte, 2020, ISBN: 9788429194586. dirección: <https://books.google.com.mx/books?id=pF80EAAAQBAJ>
- [13] F. P. Bretherton, «The motion of long bubbles in tubes,» *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 10, n.º 2, págs. 166-188, 1961.