

# Proyecto Fin de Grado

## Grado en Ingeniería de Tecnologías Industriales

### Simulación de Chorros Capilares Compuestos con Ansys

Autor: Braulio Gañán Riesco

Tutor: Miguel Ángel Herrada Gutiérrez

**Dep. Ingeniería Aeroespacial y Mecánica de Fluidos**  
**Escuela Técnica Superior de Ingeniería**  
**Universidad de Sevilla**

Sevilla, 2015





Proyecto Fin de Carrera  
Grado en Ingeniería de Tecnologías Industriales

# Simulación de Chorros Capilares Compuestos con Ansys

Autor:

Braulio Gañán Riesco

Tutor:

Miguel Ángel Herrada Gutiérrez

Profesor titular

Dep. Ingeniería Aeroespacial y Mecánica de Fluidos  
Escuela Técnica Superior de Ingeniería  
Universidad de Sevilla

Sevilla, 2015

Proyecto Fin de Carrera: Simulación de Chorros Capilares Compuestos con Ansys

Autor: Braulio Gañán Riesco

Tutor: Miguel Ángel Herrada Gutiérrez

El tribunal nombrado para juzgar el Proyecto arriba indicado, compuesto por los siguientes miembros:

Presidente:

Vocales:

Secretario:

Acuerdan otorgarle la calificación de:

Sevilla, 2015

El Secretario del Tribunal

# Agradecimientos

---

*A mi familia*

*A mis maestros*

*Sevilla, 2017*

# Resumen

---

Este Trabajo de Fin de Grado trata sobre la generación de gotas con estructura interna controlada a partir de la rotura natural (no forzada) de chorros capilares compuestos (concéntricos). La novedad de este estudio reside en que ha sido realizado íntegramente utilizando simulación numérica, siguiendo las últimas tendencias en el campo, verificándose exhaustivamente la convergencia y sensibilidad de los resultados respecto a la selección de métodos y parámetros numéricos de modelización y reconstrucción (por ejemplo, de la entrefase entre los diversos fluidos). Entre los resultados principales de este estudio destaca la capacidad predictiva del método propuesto respecto al rendimiento de encapsulación, esto es, la cantidad de producto que finalmente acaba cubierto por fluido encapsulante, para una cierta selección paramétrica de condiciones de operación. Este resultado ha sido detalladamente comparado con el más reciente trabajo publicado internacionalmente en este mismo campo y siguiendo también métodos numéricos (Vu et al. 2012). Nuestro estudio demuestra que la capacidad predictiva del procedimiento usado por Vu et al. 2012 falla catastróficamente en comparación con ciertos resultados experimentales, demostrándose que es absolutamente fundamental asegurar simultáneamente la convergencia y la sensibilidad del método para conseguir un grado de predicción satisfactorio. Así, se concluye con una serie de indicaciones sobre las mejores combinaciones paramétricas para conseguir un óptimo rendimiento no sólo en la encapsulación, sino también en el uso del propio producto encapsulante.

---

# Abstract

---

This Final Project is about the generation of droplets with controlled internal structure by using the (unforced) natural breakup of concentric capillary jets compounds. The novelty of this study is that it was entirely made using numerical simulation, following the latest trends in the field, thoroughly checked for convergence and sensitivity of the results regarding the selection of methods and numerical modeling parameters and reconstruction (for instance, when dealing with the interphase between the different fluids). The main results of this study highlight the predictive capacity of the proposed method regarding the performance encapsulation procedure, i.e., the amount of product finally encapsulated depending on the choice of operational conditions. This result has been carefully compared with the most recent internationally published works in this field and also following numerical procedures (Vu et al. 2012). Our study demonstrates that the predictive ability of the method used by Vu et al. 2012 fails to be accurate under certain experimental conditions, showing that it is absolutely essential to simultaneously ensure convergence and sensitivity of the method to achieve a satisfactory degree of prediction. Thus, we conclude with a series of guidelines on the best parametric combinations for optimal performance not only in the encapsulation, but also in the use of the encapsulating product itself.

# Índice

<b>Agradecimientos</b>	<b>5</b>
<b>Resumen</b>	<b>6</b>
<b>Abstract</b>	<b>7</b>
<b>Índice</b>	<b>8</b>
<b>Índice de Tablas</b>	<b>9</b>
<b>Índice de Figuras</b>	<b>10</b>
<b>Notación</b>	<b>11</b>
<b>1 Cubierta y Portada</b>	¡Error! Marcador no definido.
<b>2 Introducción</b>	<b>24</b>
2.1. Implementaciones comerciales de las tecnologías de chorros capilares compuestos	26
<b>3 Física de los chorros compuestos</b>	<b>28</b>
<b>4 Procedimiento numérico</b>	<b>30</b>
<b>5 Resultados numéricos y discusión</b>	<b>32</b>
5.1. Efectos del número de Reynolds	32
5.1.1. Ejemplo de microencapsulación completa en modo jetting	33
5.1.2. Ejemplo de microencapsulación parcial	33
5.1.3. Ejemplo de microencapsulación en modo dripping	34
5.2. Efectos del número de Weber	35
5.3. Efectos del ratio de tensión superficial $\sigma_{21}$	38
5.4. Efectos del ratio de velocidad $U_{21}$ de los fluidos interno e intermedio	40
5.5. Efectos del ratio de velocidad $U_{31}$ de los fluidos interno e externo	44
6 Conclusiones	46
7 Líneas futuras	47
8 Cubierta	48
<b>Referencias</b>	<b>49</b>



# ÍNDICE DE TABLAS

---

Tabla 1. Propiedades del flujo para el caso de $Re$ variable	32
Tabla 2. Propiedades del flujo para el caso de $We$ variable	35
Tabla 3. Propiedades del flujo para el caso $\sigma_{21}$ variable	38
Tabla 4. Propiedades del flujo para el caso $U_{21}$ variable	40
Tabla 5. Propiedades del flujo para el caso $U_{31}$ variable	44
Tabla 6. Influencia del ratio de velocidades $U_{31}$ en el tiempo de paso $\delta t$	45

---

# ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-1.	Boceto de definición del chorro compuesto en el seno de un fluido externo	22
Figura 2-1.	Pie de figura	24
Figura 3-1.	Mallado del dominio bajo estudio	27
Figura 4.	Microencapsulación completa en modo jetting para $Re=5$	31
Figura 5.	Microencapsulación en modo jetting para $Re=10$	32
Figura 6.	Microencapsulación en modo dripping para $Re=30$	32
Figura 7.	Microencapsulación incompleta en modo dripping para $We=0.1$	34
Figura 8.	Microencapsulación completa en modo jetting incipiente para $We=0.4$	34
Figura 9.	Microencapsulación completa en modo jetting para $We=0.7$	35
Figura 9-1.	Tiempos de formación medios para $We$ variable	35
Figura 10.	Microencapsulación incompleta en modo mixto para $\sigma_{21}=0.2$	37
Figura 11.	Microencapsulación completa en modo mixto para $\sigma_{21}=0.5$	38
Figura 12.	Microencapsulación completa en modo jetting para $\sigma_{21}=0.89$	38
Figura 13.	Microencapsulación completa en modo dripping para $U_{21}=0.79$	39
Figura 14.	Microencapsulación completa en modo dripping para $U_{21}=1.41$	39
Figura 15.	Microfotografía del proceso de rotura	40
Figura 16.	$U_{21}=3.16$ . Reconstrucción geo-reconstruct	40
Figura 17.	$U_{21}=3.16$ . Reconstrucción HRIC	41
Figura 18.	Microfotografía de un caso experimental	41
Figura 19.	Microencapsulación incompleta en modo dripping para $U_{31}=0.4$	42
Figura 20.	Microencapsulación completa en modo dripping para $U_{31}=1.58$	43
Figura 21.	Microencapsulación parcial en modo mixto para $U_{31}=4$	43
Figura 22.	Microencapsulación completa en modo jetting para $U_{31}=10$	44

# Notación

---

$Fr$	Número de Froude
$R$	Radio
$Re$	Número de Reynolds
$We$	Número de Weber
$\mu$	Viscosidad
$\sigma$	Tensión superficial
$v, U$	Velocidad
$\tau$	Tiempo característico
$\rho$	Densidad
$\delta$	Función delta de Dirac
$\delta t$	Diferencial de tiempo
$\partial/\partial r$	Derivada parcial respecto del eje radial
$\partial/\partial t$	Derivada parcial respecto del tiempo
$\partial/\partial z$	Derivada parcial respecto del eje axial
$\Delta$	Función incremento
$\nabla$	Operador Nabla
$\int$	Función integral
$nf$	Vector norma de la superficie
$k$	Doble de la curvatura media
$Xf$	Función escalón
$=$	Igual

# 1 INTRODUCCIÓN

---

Los chorros capilares resultan fundamentales como paso obligatorio en innumerables procedimientos utilizados en diversas aplicaciones industriales como la encapsulación ( Loscertales et al., 2002; Abate et al., 2011), impresión por chorro de tinta ( Heinzl y Hertz, 1985), fabricación de fibra ( Den, 1980; Loscertales et al., 2004), administración de fármacos (Mathiowitz et al., 1997) así como la atomización ( Li and Chen, 2001). Generalmente, los chorros capilares son formados forzando su flujo a través de un inyector coaxial o mediante dispositivos microfluídicos que pueden utilizar diversas fuentes de energía, como presión (Gañán-Calvo 1998), potenciales electrohidrodinámicos o electromagnéticos (Fernández de la Mora 2007; Barrero and Loscertales 2007).

En particular un chorro capilar puede conformarse coaxialmente para formar un chorro compuesto, consiste en un chorro exterior de un fluido (líquido) intermedio que rodea al chorro interno, generalmente otro líquido aunque puede también ser un gas (Gañán-Calvo y Gordillo 2001). El chorro coaxial puede descargar en el seno de otro fluido, bien directamente en el seno de un medio en reposo (inyección directa), o bien rodeado de otro fluido enfocante, en cual forma un chorro externo que puede mezclarse con el medio exterior mientras acompaña al chorro capilar (simple o compuesto). Para el resto de este estudio me referiré a estos tres fluido como fluido interno, fluido intermedio y fluido externo (Fig 1).

En general, los chorros capilares son sistemas inestables. Su inestabilidad se manifiesta cuando en su evolución se rompe dando lugar a gotas. Dicha rotura puede tener lugar muy tempranamente, cerca del punto de inyección (inestabilidad absoluta, modo de rotura “dripping”), o bien lejos de dicho punto de inyección, existiendo una zona esbelta de chorro intacto (inestabilidad convectiva, modo de rotura “jetting”). Un chorro capilar compuesto exhibe una naturaleza muy similar a la de un chorro simple. Recientemente, el uso de un fluido externo para controlar la formación y rotura del chorro compuesto se ha desarrollado para su uso en aplicaciones de encapsulación (Gañán-Calvo 1998; Loscertales et. Al 2001; Utada et al., 2005; Lee et al., 2007).

El control de los modos de rotura es fundamental en las aplicaciones derivadas de esta tecnología, siendo su principal aplicación la encapsulación. No obstante, hay pocos estudios relativos al control de estos modos. Experimentalmente, Lee y Chen (2001) investigaron un flujo compuesto de aire dentro de agua, esto es un chorro hueco, inyectado en agua en reposo y encontraron tres regímenes del proceso de rotura del chorro: formación de burbuja, formación del chorro anular y atomización. Utada et al. (2005) descubrió que cuando el flujo interno esta en modo dripping, el flujo externo puede estar en modo tanto dripping como jetting, respectivamente produciendo gotas

compuestas por una única gota interna (*single-core compound drop*) o varias gotas internas (*multi-core compound drop*). En contraste, cuando el flujo interno forma gotas a través del jetting, las gotas compuestas solo se producen si el flujo intermedio está también en modo jetting.

De forma teórica, Herrada et al. (2010) usó un método numérico (método espectral) para analizar la transición desde el modo dripping al jetting en un flujo capilar compuesto líquido moviéndose en un gas de densidad y viscosidad despreciable. Descubrieron que la transición dripping-jetting estaba no solo afectada por el número de Weber sino por los ratios de velocidad entre los dos líquidos que conforman el chorro compuesto. Además utilizaron el método del volumen de fluido implementado en el programa comercial Fluent 6.3, para validar sus análisis teóricos.

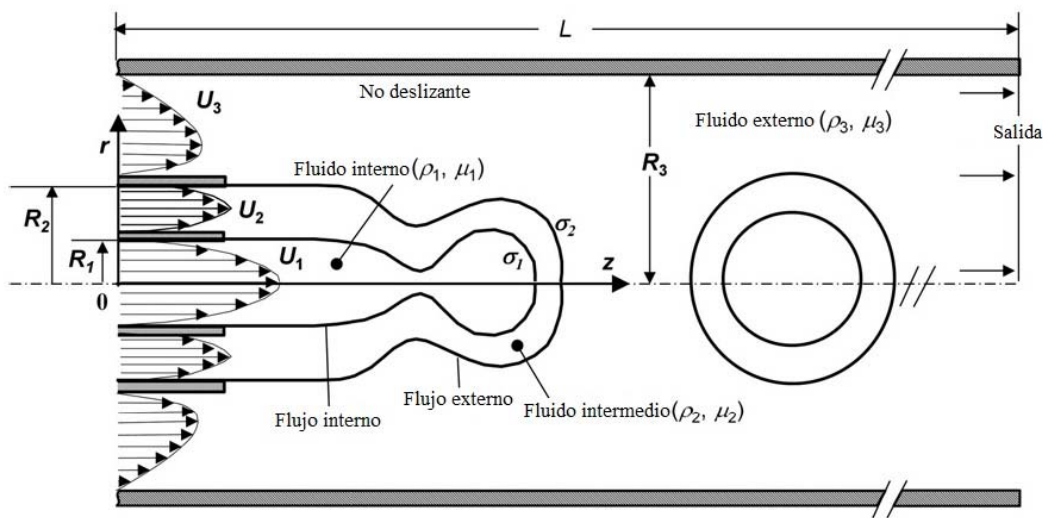


Fig 1-1. Boceto de definición del chorro compuesto en el seno de un fluido externo.

Aunque existen numerosos estudios teóricos y experimentales, las simulaciones numéricas de la formación de los modos mencionados con anterioridad son escasos todavía. Tchavdarov et al. (1994) usaron el método de los elementos finitos para investigar el proceso de rotura de un chorro compuesto rodeado de gas, el cual no interactúa con el chorro líquido. Sus resultados computacionales están en concordancia con los anteriores datos del análisis lineal realizado por Radev y Tchavdarov (1988), pero solo pueden ser aplicados para el modo jetting. Otros estudios relativos al efecto de diferentes parámetros como la densidad, la viscosidad o la tensión superficial han sido estudiados a lo largo de las dos últimas décadas. Sin embargo, hay insuficientes detalles numéricos en la literatura de ambos modos (dripping y jetting especialmente en el sistema de coflujo).

El estudio propuesto por Vu et al. (2012), el cual trato de recrear, depurar y extender en este trabajo, surge de la literatura en este campo de la simulación numérica. El estudio se centra sobre los diferentes modos de evolución y rotura del chorro compuesto en el

seno de un sistema de coflujo líquido inmiscible. Estudiaron los efectos de varios parámetros adimensionales como el número de Reynolds, el número de Weber, el ratio de tensión superficial y los ratios de velocidad entre los fluidos. El método numérico que utilizaron fue el “front-tracking finite difference method”. El objeto de este trabajo será tratar de reproducir la totalidad de los resultados obtenidos mediante el método de volúmenes finitos incluido en el simulador comercial Fluent 14.0.

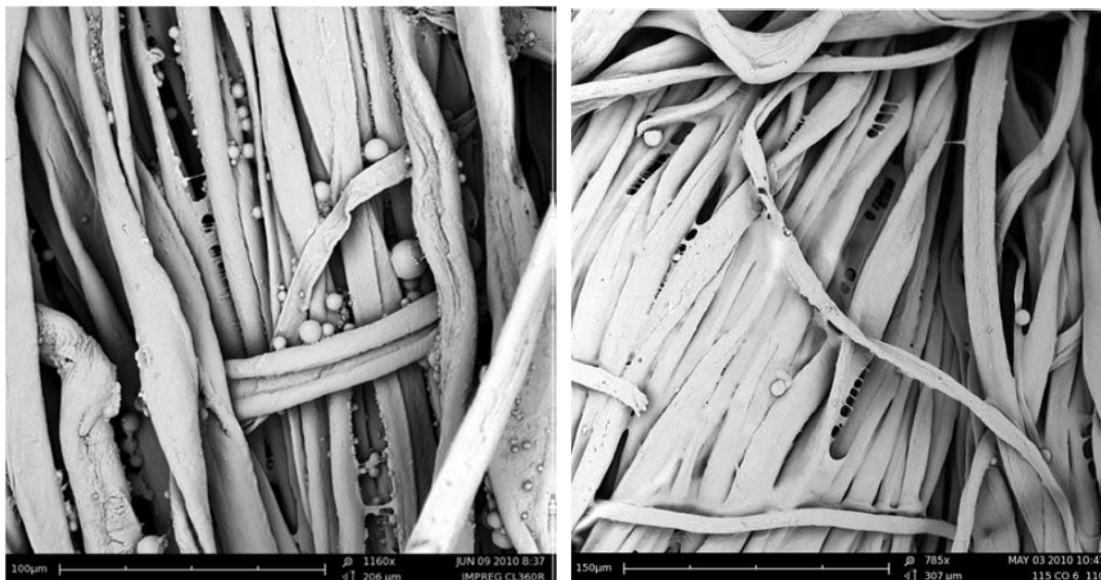
### **1.1.- Implementaciones comerciales de las tecnologías de chorros capilares compuestos.**

Las primeras aplicaciones de productos microencapsulados nacieron con el papel copiante sin carbón (Zhang, Saunders y Thomas, 1999) y se hicieron muy importantes en el campo de la farmacéutica (Stolnik, 1995). En otra áreas como la cosmética (Gisbert et al., 2009; Kapunsnik y Tomasik, 2006), alimentación (Wegmuller, Zimmermann, Buhr, Windhab y Hurrell, 2006), insecticidas (Boh y Kornhasuer, 2003; Paya, Bonet, Aboy y Perez, 2010) y adhesivos (Giroud, Pernot, Brun y Pouyet, 1995), los ingredientes microencapsulados son considerados un potencial aditivo para mejorar las propiedades de sus productos. La principal ventaja de la microencapsulación es la nueva funcionalidad que puede proveer al producto final. Por ejemplo, se pueden conferir propiedades de aromaterapia persistentes en los tejidos usando fragancias microencapsuladas.

Podemos observar una amplia variedad de productos activos, como fragancias (Li, Lewis, Stewart, Quian, y Boyter, 2008; Monllor, Bonet y Cases, 2007; Monllor, Bonet, Sanchez y Cases, 2009; Monllor et al., 2010; Nelson, 2001), materiales de cambio de fase (Fan, Zhang, Wang, Li, y Zhu, 2004; Hawlader, Uddin y Khin 2003; Xiao-Zheng et al., 2003; Zhang, Tao, Yick y Wang, 2004), tintes (Chang et al., 2003; Sawada y Urakawa, 2005) y agentes antibacterias (Gisbert et al., 2009; Madene, Jacquot, Scher y Desobry, 2006; Nelson, 2002; Wang y Chen, 2005), los cuales hacen de las microcápsulas un campo atractivo para su estudio. Naturalmente, las aplicaciones patentadas han ido aumentando. La naturaleza y la química del recubrimiento también han variado (Madene, Jacquot, Scher y Desobry 2006; Nelson, 2002; Wang y Chen, 2005). Cuando dichos productos son aplicados sobre materiales oleosos, han ganado mucha atención los amino polímeros como la melanina formaldehído o urea formaldehído, debido a la posibilidad de incrementar la vida del recubrimiento y la administración dirigida (Long, York, Zhang y Preece, 2009). Además, pueden encontrarse recubrimientos activos como el quitosan (Gisbert et al., 2009).

Cuando las microcápsulas son aplicadas sobre tejidos, se usan comúnmente recubrimientos no activos; de otra manera, tenderían a coalescer. Como resultado de esta estabilidad química, no puede tener lugar ninguna reacción entre la microcápsula y la fibra. Por tanto, algunos productos auxiliares son adheridos a la fibra para mejorar la unión con las microcápsulas a fin de mejorar la resistencia al lavado y uso, (Nelson, 2001). Dichos productos están normalmente basados en acrílicos, poliuretanos o resinas de silicona (Li et al., 2008). Si la afinidad entre la microcápsula y la fibra no fuera

suficiente, es necesario adherir una resina a la fibra junto con un proceso mecánico para aplicarla en el tejido; no obstante, diversas marcas comerciales sugieren distintos medios, dependiendo del proceso aplicado. Los métodos más usados son la transferencia por presión con una matriz impregnada de microcapsulas (*padding*), o bien la saturación por inmersión del tejido en un baño (*bath exhaustion*). Además se puede utilizar espuma como sistema de aplicación.



**Fig 2-1.** A la izquierda tejido sometido a ‘padding’ con 60 g/L de microcápsulas y 10 g/L de agente ligante. A la izquierda, tejido bajo inmersión con 6% owf (*over weight of fibre*).

La tecnología de administración controlada de fármacos representa una de las fronteras de estudio de la ciencia, el cual engloba un enfoque multidisciplinar, contribuyendo al cuidado de la salud de los humanos. Estos sistemas de administración ofrecen numerosas ventajas en comparación con los sistemas convencionales de dosificación, que incluyen una mejora de la eficacia, reducción de la toxicidad, y mayor comodidad y conveniencia para el paciente. Estos sistemas normalmente utilizan macromoléculas como portadores de los fármacos. De esta forma, diversos tratamientos que no se podría realizar de otra manera son ya usados de forma convencional. Este campo de la tecnología farmacéutica ha crecido y se ha diversificado rápidamente en los últimos años. Las barreras de los métodos de administración controlada para los no especialistas pueden ser la variedad de nuevos polímeros y su interacción bioquímica, así como las propias tecnologías inherentes al proceso de producción de los microencapsulados. De los diferentes métodos de dosificación reportados, las nanopartículas y las micropartículas han alcanzado gran importancia, por su posibilidad de acumulación en áreas inflamadas del cuerpo (reportándose concentraciones tres veces superiores a zonas no inflamadas). Por sus atractivas propiedades, las nano- y micropartículas ocupan una posición única en la industria tecnológica del suministro de fármacos.

## 2 FÍSICA DE LOS CHORROS COMPUESTOS

La figura 1 muestra el típico sistema de coflujo de tres fluidos viscosos inmiscibles, asumimos que el sistema es axisimétrico. El flujo compuesto es inyectado a través de un inyector coaxial que se encuentra dentro del fluido externo que es inyectado en un tubo cilíndrico coaxial. El fluido interno (densidad  $\rho_1$  y viscosidad  $\mu_1$ ) es inyectado a través del inyector interno de radio  $R_1$  ( $d_1 = 2 R_1$ ) en el coflujo de un fluido intermedio (densidad  $\rho_2$  y viscosidad  $\mu_2$ ) inyectado en el espacio anular del inyector coaxial. El radio de este último inyector es  $R_2$  ( $d_2 = 2 R_2$ ). El fluido externo (densidad  $\rho_3$  y viscosidad  $\mu_3$ ) fluye a través de un tubo de radio interno denotado por  $R_3$ . En la entrada, las velocidades medias de los fluidos interno, intermedio y externo están respetivamente definidas por  $U_1$ ,  $U_2$  y  $U_3$ . Un perfil de velocidad completamente desarrollado es aplicado en la entrada del inyector coaxial. Asumimos que la densidad, viscosidad y la tensión superficial son constantes para los tres fluidos.

Usamos un único sistema de ecuaciones de gobierno para fluidos newtonianos e incompresibles, válidas para todo el flujo y tratando las diferentes fases inmiscibles como un único fluido de densidad y viscosidad variable, pero con tensión superficial entre las entrefases. En coordenadas cilíndricas ( $r, z, \varphi$ ), las ecuaciones de gobierno para nuestro problema axisimétrico son las siguientes:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \rho \mathbf{g} + \int_f \sigma k \mathbf{n}_f \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) dS \quad (2)$$

Aquí,  $u$  y  $v$  son las componentes radial y axial de la velocidad  $\mathbf{u}$ ,  $p$  es la presión,  $\mathbf{g}$  es la aceleración de la gravedad. Las entrefases están definidas por  $f$ ,  $\sigma$  es la tensión superficial,  $k$  es el doble de la curvatura media, y  $\mathbf{n}_f$  es el vector normal a la interfase. La función delta de Dirac  $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)$  es cero siempre excepto para una función escalón en la entrefase  $\mathbf{x}_f$ .  $T$  define la transpuesta.  $S$  indica la superficie interna y externa del chorro compuesto y la gota.  $D/Dt$  es la derivada temporal \*\*\*. Las propiedades físicas, concretamente la densidad y viscosidad, de cada fluido permanecen constantes. Las condiciones de contorno son las definidas en la Fig 1. Las condiciones de contorno de simetría están fijadas en el eje de simetría. Para prevenir las recirculación cerca de la salida del dominio de simulación (Homma et al., 2006) las condiciones de contorno a la salida,  $u = 0$  y  $\partial v / \partial z = 0$ , son aplicadas en  $z = L$ . La condición de pared no deslizante es aplicada tanto al tubo como a las paredes del inyector. A la salida del inyector  $z = 0$ , los perfiles de velocidad aplicados a la entrada son los siguientes:

$$u = 0$$



$$v = \begin{cases} 2U_1\{1 - (r/R_1)^2\} & \text{for } 0 \leq r \leq R_1 \\ 2U_2 \left\{ \frac{\frac{R_2^2 - r^2}{R_2^2} + \frac{(R_2^2 - R_{1w}^2)/R_2^2 \ln(\frac{r}{R_2})}{\ln(\frac{R_2}{R_{1w}})}}{1 + \frac{R_{1w}}{R_2} \frac{1 - (\frac{R_{1w}}{R_2})^2}{\ln(\frac{R_2}{R_{1w}})}} \right\} & \text{for } R_{1w} \leq r \leq R_2 \\ 2U_3 \left\{ \frac{\frac{R_3^2 - r^2}{R_2^2} + \frac{(R_3^2 - R_{2w}^2)/R_3^2 \ln(\frac{r}{R_3})}{\ln(\frac{R_3}{R_{2w}})}}{1 + \frac{R_{2w}}{R_3} \frac{1 - (\frac{R_{2w}}{R_3})^2}{\ln(\frac{R_3}{R_{2w}})}} \right\} & \text{for } R_{2w} \leq r \leq R_3 \end{cases} \quad (3)$$

donde  $R_{1w} = R_1 + W_n$  y  $R_{2w} = R_2 + W_n$ . Es necesario hacer notar aquí que las expresiones (3) corrigen a las propuestas por Vu et. al (2012), que no verifican las condiciones de contorno. Asumimos que el inyector coaxial tiene un espesor  $W_n$  de  $0.2R_1$  y una longitud  $L_n$  de  $2R_1$ . La amplitud del dominio  $R_3$  es de  $10 R_1$ . Para  $t = 0$ , el fluido esta en reposo,  $u = v = 0$ , y las superficies interfaciales interna y externa del chorro compuesto tienen forma esférica. También inicializamos la presión del dominio en cero. Esta condición no es física pero es sencilla de implementar. El transitorio muere rápidamente y se desarrolla un perfil de presión realista en escalas de tiempo cortas frente al desarrollo del flujo.

El sistema de parámetros no dimensionales que gobierna la dinámica del chorro compuesto en coflujo con el fluido exterior son: el número de Reynolds  $Re$ , el número de Weber  $We$ , el número de Froude  $Fr$ , los ratios de densidad  $\rho_{21}$  y  $\rho_{31}$ , los ratios de viscosidad  $\mu_{21}$  y  $\mu_{31}$ , los ratios de tensión superficial  $\sigma_{21}$  y  $\sigma_{31}$ , los ratios de velocidad  $U_{21}$  y  $U_{31}$ , y los ratios de los radios del inyector  $R_{21}$ ,

$$Re = \frac{\rho_1 U_1 R_1}{\mu_1}, \quad We = \frac{\rho_1 U_1^2 R_1}{\sigma_1}, \quad Fr = \frac{U_1^2}{g R_1} \quad (4)$$

$$\rho_{21} = \frac{\rho_2}{\rho_1}, \quad \rho_{31} = \frac{\rho_3}{\rho_1}, \quad \mu_{21} = \frac{\mu_2}{\mu_1}, \quad \mu_{31} = \frac{\mu_3}{\mu_1} \quad (5)$$

$$\sigma_{21} = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}, \quad \sigma_{31} = \frac{\sigma_3}{\sigma_1}, \quad U_{21} = \frac{U_2}{U_1}, \quad U_{31} = \frac{U_3}{U_1} \quad (6)$$

Aquí,  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son las tensiones superficiales entre los fluidos interno e intermedio, y entre los fluidos intermedio y externo respectivamente. El tiempo  $t$  está adimensionalizado respecto de  $U_1$  y  $R_1$ ,

$$\tau = \frac{t R_1}{U_1} \quad (7)$$

### 3 PROCEDIMIENTO NUMÉRICO

---

Con el fin de predecir la geometría de la interfase durante la evolución temporal, varias técnicas son usadas habitualmente, incurriendo en una de las tres categorías.

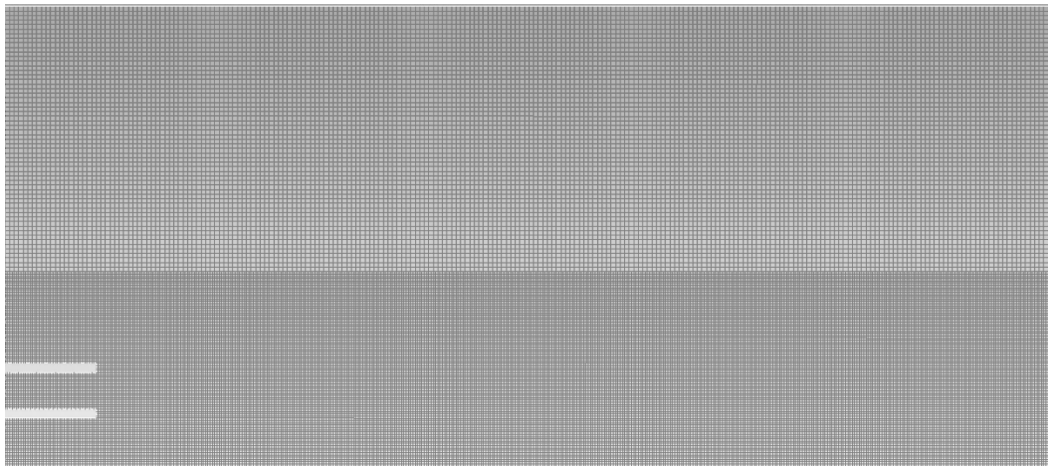
Están (i) los métodos de seguimiento de la interfase (*interface tracking methods*), que incluyen una malla en movimiento (Kothe y Rider 1995), (ii) esquemas de seguimiento frontal y de partículas (Unverdi y Tryggvason 1992), y (iii) métodos de captura de la interfase, que incluyen el volumen de fluido (VOF) (Harvei y Fletcher 2000; Aulisa, Manservigi y Scardovelli 2003) y técnicas de ajuste de nivel (Tanguy y Berlemont 1984). Hemos elegido un método VOF consistente en dos partes: un algoritmo de reconstrucción de la interfase para aproximarla a partir de un sistema de fracciones de volumen y un algoritmo de transporte VOF para determinar la fracción a un nuevo diferencial de tiempo a partir del campo de velocidades y el frente reconstruido. El método básico es robusto y flexible, y está basado en los esquemas VOF que son ampliamente usados (Hirt y Nichols 1984; Heinrich 1991; Tomiyama et al., 1993; Lafauire et al., 1994).

El método VOF finitos permite discretizar y resolver numéricamente ecuaciones diferenciales de transporte. Es un método alternativo a los de diferencias finitas y elementos finitos. Consideremos una malla de discretización del espacio fluido. En torno a cada punto de esta malla se construye un volumen de control que no se solapa con los de los puntos vecinos. De tal forma, el volumen total del fluido resulta ser igual a la suma de los volúmenes de control considerados. La ecuación diferencial a resolver se integra sobre cada volumen de control, lo cual da como resultado una versión discretizada de dicha ecuación. Para realizar la integración se requiere especificar perfiles de variación de la variable dependiente entre los puntos de la malla, como medio para poder evaluar las integrales resultantes. La principal propiedad del sistema de ecuaciones discretizadas resultante, es que la solución obtenida satisface de forma exacta las ecuaciones de conservación consideradas, independientemente del tamaño del mallado.

Por conveniencia y con el objetivo de hacer nuestros resultados fácilmente reproducibles por otros, hemos utilizado el conocido y testado programa comercial FLUENT v 14.0 para resolver la continuidad de la masa discretizada, conservación de momentos y las ecuaciones de las fracciones de volumen líquido en la malla descrita en la figura 2, generada con la herramienta de mallado proporcionada por el entorno de trabajo ANSYS Workbench 14.0 y utilizada en FLUENT 14.0 (laminar no estacionario). Todas las celdas son cuadradas y del mismo tamaño, aunque para la mayoría de los casos estudiados ha sido necesario un remallado más fino en la zona central con el objetivo de aumentar la precisión de la interfase debido a los fuertes gradientes de tensión superficial que se producen entre las entrefases. El remallado más

fino lo hemos concentrado a la salida del inyector central, donde el desarrollo transitorio del problema está más acentuado. La malla básica es lo suficientemente precisa para capturar el flujo externo impuesto sobre el líquido externo. En la malla mostrada en la fig. 2 la mínima longitud radial y axial de las celdas es  $(\Delta z)_{min} = (\Delta r)_{min} = 0.025$ . Tras realizadas varios test con tamaños de celda más pequeñas se ha verificado que la malla final tiene un nivel de presión suficiente para describir la interfase para todos los casos considerados, los recursos de tiempo de computación también han sido un factor a tener en cuenta durante el refinamiento de la malla, pues junto con el diferencial de tiempo de paso son los valores que más afectan al gasto computacional. Todos los casos tienen un refinamiento central a la altura del inyector central con un tamaño de celda de  $(\Delta z)_{min} = (\Delta r)_{min} = 0.05$ .

Un factor que requiere consideración es la localización de los límites de salida. Tienen que estar lo suficientemente alejados del inyector como para tener un flujo no transitorio sin memoria de las condiciones iniciales. Para este problema en particular no debemos preocuparnos por la reflexión de ondas de presión en la salida, pues estamos trabajando con un modelo incompresible (todos los flujos son líquidos). Por otra parte, las condiciones de contorno artificialmente impuestas en la salida pueden causar problemas cuando el chorro fluye a través de la superficie, y más concretamente, cuando pasa una cadena de gotas a través. Por lo tanto, hemos escogido una profundidad de la cámara de  $L = 10R_1$ , para minimizar los efectos artificiales producidos por las condiciones de contorno en los resultados obtenidos.



**Fig 3-1.** Mallado del dominio bajo estudio. Se provee de un mallado más fino en áreas donde las interfaces esperan encontrarse. Para evitar la difusión numérica de la interfase, la región se ha definido con un mayor número de nodos.

El seguimiento de la interfase entre las fases se consigue resolviendo una ecuación de continuidad para la fracción de volumen de las fases usando un sistema de tiempo impuesto explícito. El resto de ecuaciones se resuelve de forma implícita. Los tiempo de paso de integración seleccionados no han sido fijados a un valor concreto, aunque tienen un máximo admisible para asegurar que el número de Courant global basado en el tamaño de celda, la velocidad media en la celda y el tiempo de paso este siempre en un valor menor a dos. Con respecto a la discretización espacial de la ecuaciones, el sistema

de tercer orden modificado MUSCL (Leer 1979) es usado para obtener los flujos de las fases siempre que la celda este completamente inmersa en una única fase. Cuando la celda está cerca de la enterfase, se usa el algoritmo Geo-Reconstruct (Youngs 1982). Las correcciones en la presión son computerizadas con el sistema de fuerzas másicas ponderadas y el acoplamiento velocidad-presión en el resolovedor segregado con el método PISO (Issa 1986). Todos los factores “under-relaxation” (presión y momento) se fijan en uno para evitar la desaparición de cualquier efecto de enmascaramiento numérico en nuestro problema físico.

# 4 RESULTADOS NUMÉRICOS Y DISCUSIÓN

Investigamos en los siguientes apartados varios modos de rotura del chorro compuesto y de la transición entre dripping y jetting en respuesta a la variación de los parámetros adimensionales  $Re$ ,  $We$ ,  $U_{21}$ ,  $U_{31}$ ,  $\sigma_{21}$  y  $R_{21}$ . Prestamos atención a chorros compuestos de líquidos como agua, aceite y otros fluidos con propiedades similares (Abate et al., 2007) con un diámetro de unos cientos de  $\mu m$ . Además, asumimos que las propiedades de los fluidos interno y externo son iguales exceptuando la tensión superficial, con el objeto de comparar nuestros resultados con Vu et al. (2012). Por lo tanto, fijamos los ratios de densidad y viscosidad para el resto de nuestra simulación durante este estudio:  $\rho_{21} = 0.6$ ,  $\mu_{21} = 0.8$ ,  $\rho_{31} = \mu_{31} = 1$ . Bajo estas condiciones los efectos de la gravedad en los procesos de rotura son despreciables,  $1/F_r = 0$ .

Como se ha explicado anteriormente, el modo dripping produce gotas cerca de la fuente, este caso el capilar inyector. Por el contrario, el modo jetting produce gotas lejos, aguas abajo del inyector. Investigamos durante este trabajo estos modos de formación. Y los rangos de los parámetros estudiados corresponden a las transiciones entre los distintos modos.

## 4.1. Efectos del número de Reynolds

Las condiciones del flujo de esta sección se reflejan en la tabla siguiente:

$We$	$\sigma_{21}$	$U_{21}$	$U_{31}$	$R_{21}$
0.6	1	1	1	2

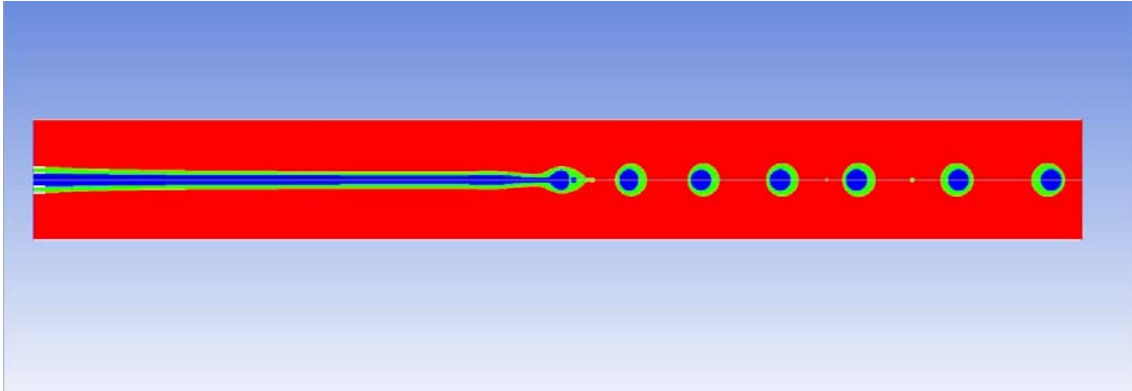
**Tabla 1.** Propiedades del flujo para el caso  $Re$  variable

A partir del número de Weber, el resto de variables son dependientes y se resuelven de manera lineal. El número de Reynolds se varía en un rango entre 5 y 30, lo cual modifica en nuestro caso la viscosidad de las fases.

Las figuras 4,5 y 6 muestran los efectos del número de Reynolds en la formación y rotura de un chorro capilar compuesto. De aquí en adelante se definen las diferentes fases en las imágenes: al fluido interno (azul), fluido intermedio o encapsulante (verde) y fluido externo o enfocante (rojo).

### 4.1.1. Ejemplo de microencapsulación completa en modo jetting

La primera simulación tuvo varios problemas hasta llegar a una solución precisa. Las relaciones de tensiones superficiales ( $\sigma_1, \sigma_2$  y  $\sigma_3$ ) no estaban bien definidas en el artículo estudiado, dando lugar a interacciones no deseadas entre las fases 1 y 3. Mas concretamente es  $\sigma_{31}$  quien aun estando definido claramente no se especifica ningún valor en concreto, esto puede ser debido a que en principio de debería existir contacto directo entre las fases 1 y 3. Aunque tras varias pruebas modificando  $\sigma_3$  llegamos a la conclusión de que dicho valor influía de manera notable al aumentar su valor por encima del resto de tensiones superficiales. La relación que mejores resultados ofrecía era  $\sigma_{31} = 1$ .



**Fig 4.** Microencapsulación completa en modo jetting para  $Re = 5$

Disminuir el número de Reynolds corresponde a incrementar las fuerzas viscosas que resisten la deformación y rotura del chorro (Suryo et al., 2006) y por consiguiente resulta en un incremento de la longitud del chorro (Fig 4) así como las distancias de rotura. Para un  $We$  fijado, el aumento del número de Reynolds favorece el modo dripping como se muestra en la figura 5. Este modo de rotura es extremadamente complejo en presencia de diversas fases, y durante el desarrollo de este trabajo nos hemos encontrado con dificultades para refinar las soluciones. Tanto el algoritmo utilizado para modelar la interfase entre el fluido 1 y 2 como el tamaño y tiempo de residencia son factores críticos.

#### 4.1.2. Ejemplo de microencapsulación parcial

El segundo caso ilustra un fenómeno que se observa experimentalmente y que debe ser evitado debido a la eyección de la sustancia que se pretende encapsular, resultado en la consabida falta de eficiencia de encapsulación (rendimiento bien conocido en tecnología farmacéutica). Este ejemplo ha sido simulado con diferentes métodos de reconstrucción de la interfase, obteniendo la mejor simulación con el Geo-Reconstruct. Con la combinación de parámetros para este caso se ilustra un ciclo estable mixto de formación de microcápsulas, donde el 50% de los núcleos internos es expulsado (*single-core compound drop*). Durante las repetidas simulaciones citadas se observó que una disminución del tiempo de paso, por debajo de un límite, no modificaba la precisión de

nuestra solución, concluyéndose que los resultados observados numéricamente deben necesariamente reflejar las condiciones y fenómenos físicos reales.

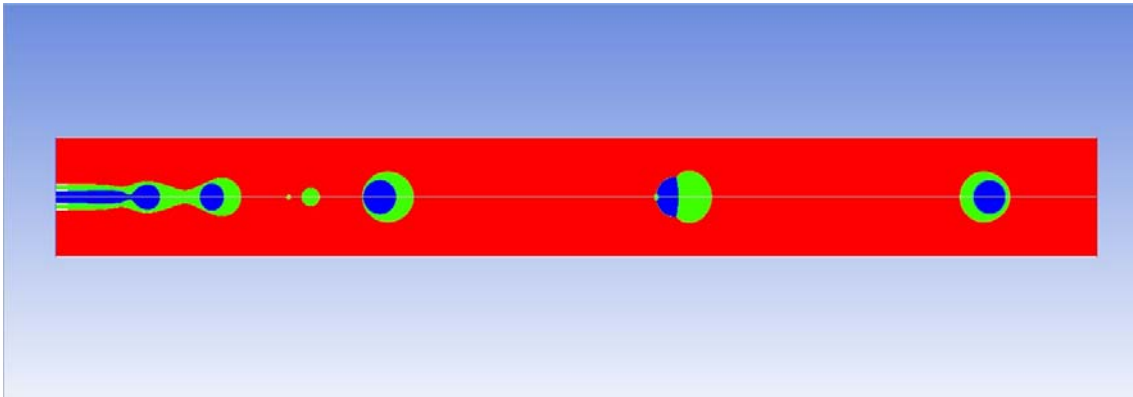


Fig 5. Microencapsulación en modo jetting para  $Re = 10$

#### 4.1.3. Ejemplo de microencapsulación en modo dripping

La complejidad del modo dripping se ve reflejada en la figura 6. La formación y rotura se desarrollan cerca de la fuente del chorro, en una zona transitoria con memoria de las condiciones iniciales. No fue posible ajustar una solución para obtener núcleos centrados. En el entorno de la combinación de parámetros de este estudio ha sido muy difícil encontrar condiciones de encapsulación apropiadas (estables y reproducibles) en el modo dripping que se alcanza variando el número  $Re$  en el entorno de la combinación paramétrica aquí estudiada.

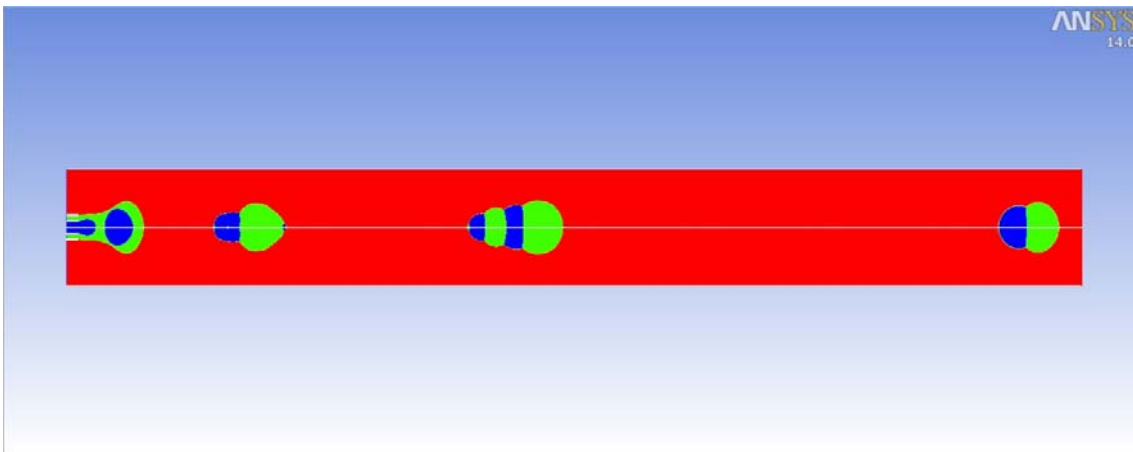


Fig 6. Microencapsulación en modo dripping para  $Re = 30$

Como puede observarse, la eficacia de la encapsulación en este caso es prácticamente nula.

Para las anteriores simulaciones se utilizó el máximo diferencial de tiempo de paso para minimizar el gasto computacional, este tiempo es de  $\delta t = 0.035$ . La estabilidad de la interfase estaba garantizada a partir de este valor.

## 4.2. Efecto del número de Weber

Las condiciones del flujo de esta sección se reflejan en la tabla siguiente:

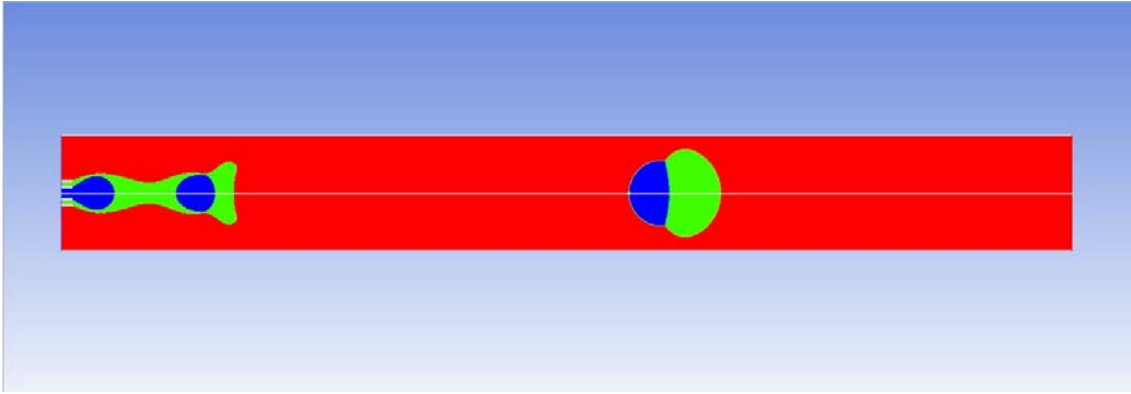
$Re$	$\sigma_{21}$	$U_{21}$	$U_{31}$	$R_{21}$
5	1	1	1	2

**Tabla 2.** Propiedades del flujo para el caso  $We$  variable

Las figuras 7, 8 y 9 muestran la formación y rotura del chorro capilar compuesto en el entorno paramétrico estudiado en esta sección, variando el número de Weber ( $We$ ). La rotura de un chorro compuesto es causada por la interacción de entre las superficies interiores y exteriores, presión capilar así como el balance de fuerzas como las fuerzas de tensión superficial, la inercia y la fuerza viscosa (Zhou et al., 2006). El número  $We$  caracteriza la relación entre las fuerzas aerodinámicas ejercidas sobre la superficie del chorro y las fuerzas de tensión sufridas por dicha superficie. Puesto que todos los parámetros adimensionales se mantienen constantes exceptuando al  $We$ , el desarrollo del chorro compuesto experimenta dos fuerzas competidoras en la dinámica del sistema: la inercia del flujo aguas abajo y la fuerza superficial que trata de confinarlo alrededor de la fuente. Hacemos variar el valor de  $We$  entre 0.1 y 0.7. El parámetro modificado es la relación de tensiones superficiales entre los fluidos.

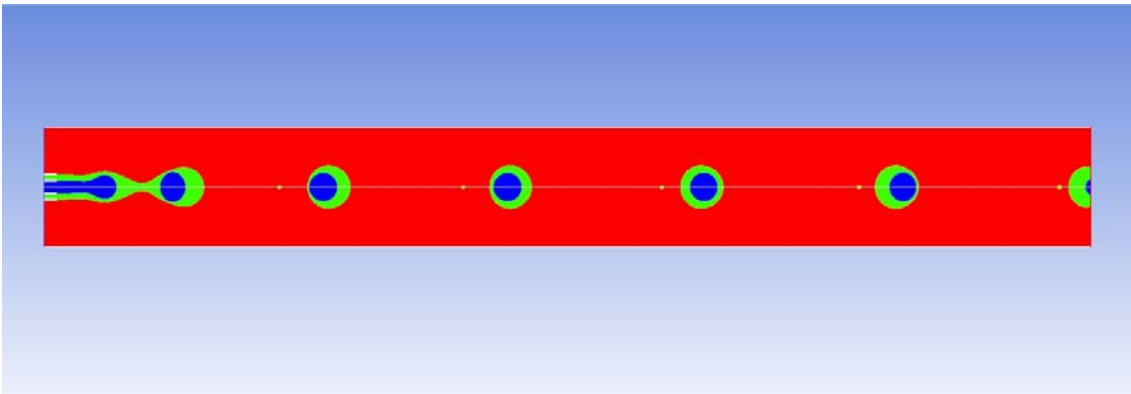
Al aumentar el número de Weber, la longitud del chorro aumenta como se ha explicado en el párrafo anterior. Y en consecuencia también lo hace la distancia de rotura. En contraste, el incremento en el número de Weber disminuye el tamaño de las gotas compuestas como se muestra en la figura 5. Se ha observado que durante un modo dripping puro como el que se estudia en esta sección se producen únicamente gotas monodispersas (Utada et al., 2005), es decir, sin satélites de menor tamaño o con una sola fase en su interior. Los estados cuasiestáticos y con fuerzas superficiales fuertemente predominantes vuelven a ser un problema para la correcta encapsulación en el caso de  $We = 0.1$ . El núcleo es expulsado tras llegar al estado estacionario. Durante el desarrollo de la gota encapsulada, el núcleo no se centra con respecto al fluido intermedio y la fina capa superficial acaba colapsando para formar un conjunto de dos fluidos unidos por una pared intermedia. Esta combinación paramétrica debe por tanto ser evitada experimentalmente.





**Fig 7.** Microencapsulación incompleta en modo dripping para  $We=0.1$

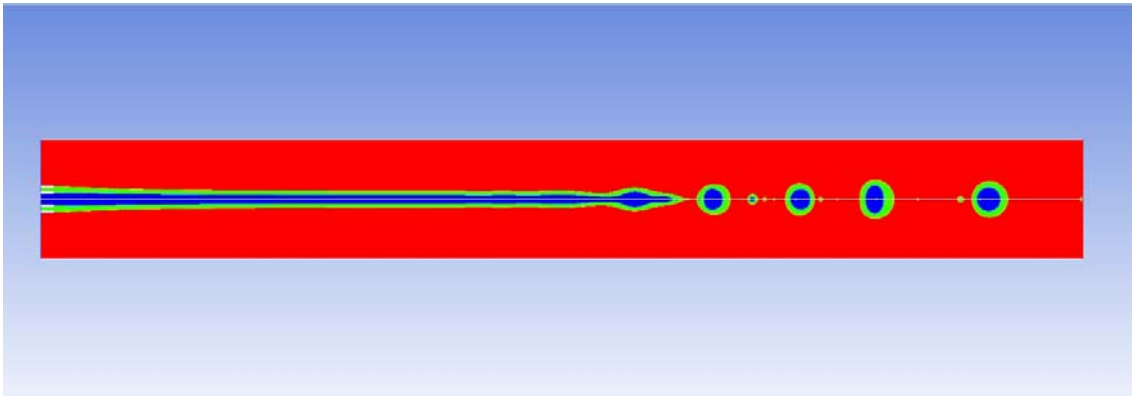
El elevado valor de  $\sigma$  provoca inestabilidad computacional y arrastre de residuales en la interfase si el  $\delta t$  no es lo suficientemente pequeño. Aunque se fijó con anterioridad un número de Courant para determinar la validez de nuestras simulaciones, para casos con fuertes gradientes de tensión superficial, el ajuste lo impone la correcta estabilidad de la interfase. A pesar de no ser precisa la primera simulación, la interfase está bien definida tras reducir el tiempo de paso  $\delta t$  un 83% respecto del caso anterior para  $Re$  variable. Esto garantiza la fidelidad física de las conclusiones que se obtienen también en este caso.



**Fig 8.** Microencapsulación completa en modo jetting incipiente para  $We = 0.4$

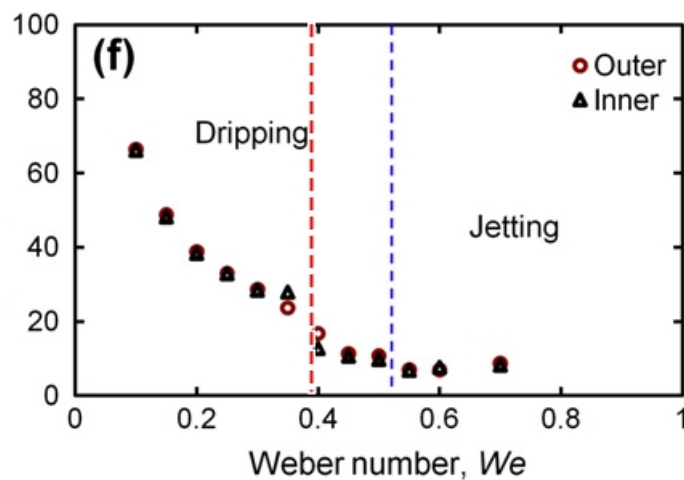
La figura 5c muestra como el aumento de  $We$  causa una disminución del tiempo medio de formación de la gota interior y compuesta. Existe una relación entre la disminución del tiempo de formación de gotas y el incremento de la longitud de rotura del chorro producido por el aumento de  $We$ .

La combinación paramétrica de esta sección ilustra otro fenómeno fundamental en la producción de microcapsulas relacionado con las longitudes y tiempos de rotura relativos entre los chorros interno y externo. Para el mismo número de Weber, se observa que el tiempo de formación de la gota interna es igual a la gota compuesta, dando como resultado únicamente gotas single-core, con eficiencia de encapsulación completa en las dos últimas combinaciones paramétricas.



**Fig 9.** Microencapsulación completa en modo jetting para  $We = 0.7$

Es interesante observar aquí que tanto el caso de la figura 8 como el caso 9 exhiben encapsulación completa con una longitud de chorro intacta que en el caso 8 es muy corta, a diferencia del caso 7 en la que no existe longitud intacta alguna. En relación con el trabajo de Vu et al. (2012) y en contraste con aquél, queremos aquí identificar lo que entendemos como modo dripping a la total ausencia referida de longitud intacta desde la fuente. Para Vu et al. (2012), el caso 8 es identificado como dripping, mientras que siguiendo el criterio aquí propuesto, dicho caso correspondería a un modo jetting incipiente, pero jetting en definitiva, en consistencia con las características obtenidas en el resto del régimen jetting aumentando el número de  $We$ . De hecho en la figura 11(f) del artículo al que hacemos referencia, sugieren un corte (azul) tras el cual consideran que la simulación se encuentra en fmodo dripping. Nosotros acorde con lo dicho anteriormente hemos observados que es más coherente asumir ese corte (rojo) antes de  $We=0.4$ . Puede apreciarse que la disminución del tiempo de formación se acentúa tras 0.4.



**Fig 9-1.** Tiempos de formación medios para  $We$  variable

### 4.3. Efectos del ratio de tensión superficial $\sigma_{21}$

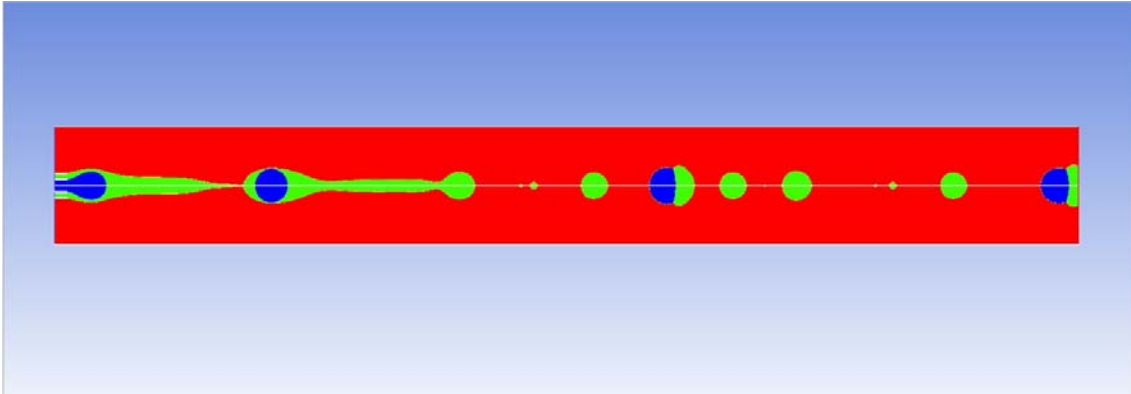
Las condiciones del flujo de esta sección se reflejan en la tabla siguiente:

$Re$	$We$	$U_{21}$	$U_{31}$	$R_{21}$
5	0.3	1	1	2

**Tabla 3.** Propiedades del flujo para el caso  $\sigma_{21}$  variable

Las figuras 10, 11 y 12 muestran los efectos de  $\sigma_{21}$  en la formación y rotura de un chorro compuesto dentro del rango variable del ratio de tensión superficial, para el cual el chorro interno está en modo dripping. Para este caso en particular,  $\sigma_1$  está fijado y se despeja de la ecuación (4). Por lo tanto al disminuir el ratio  $\sigma_{21}$  aumentamos la tensión superficial entre el fluido intermedio y externo  $\sigma_2$ . Para  $\sigma_{21} = 0.89$  (fig 12) la fuerza superficial actuando sobre la superficie intermedia es comparable a la inercia del fluido, por lo que el chorro intermedio también produce gotas en el modo dripping. Al disminuir el ratio de tensión superficial, la inercia se hace dominante progresivamente, y el chorro intermedio rompe cada vez más lejos (fig 11). A un bajo  $\sigma_{21}$  (fig 10), la gota interna formada por dripping viaja con la corriente en el chorro tubular intermedio antes de que este último rompa y se retraiga para formar una gota compuesta. Así, se produce un modo mixto dripping-jetting que da lugar a gotas compuestas single-core y gotas simples. De esta manera, aunque la eficiencia de encapsulación puede ser máxima (figura 11), se desaprovecha una parte importante del fluido encapsulante o corteza. En esta combinación paramétrica se ve claramente como  $\sigma_{21}$  tiene efectos mínimos en las distancias de rotura y diámetro medio para el chorro interno. Sin embargo, el incremento de  $\sigma_{21}$  corresponde en una disminución de la fuerza de tensión superficial que sujeta el chorro intermedio en desarrollo y lo mantiene unido a la punta del inyector, y esto incrementa la distancia de rotura del chorro intermedio y disminuye ligeramente el diámetro medio de las gotas compuestas.

Para llegar a la solución final expuesta en la figura 10, se refinó la malla en la zona central hasta depurar la mayoría de problemas con la expulsión de núcleos en las gotas compuestas formadas mediante el modo mixto. El tiempo de paso  $\delta t$  no fue un elemento característico y fue fijado en  $\delta t = 0.025$  para los casos a y b, y en  $\delta t = 0.02$  para el caso c. Esa ligera disminución está relacionada con la inestabilidad ya mencionada anteriormente que aparece para valores altos de la tensión superficial entre las diferentes fases.

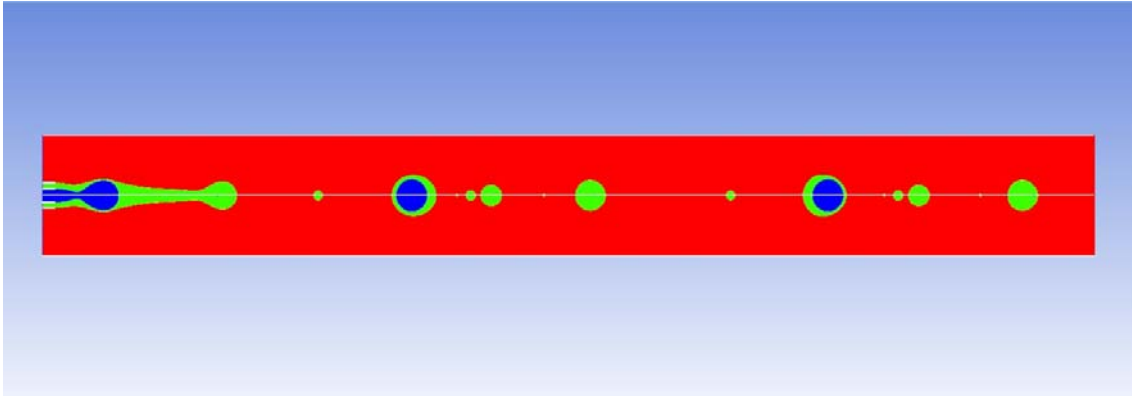


**Fig 10.** Microencapsulación incompleta en modo mixto para  $\sigma_{21} = 0.2$

La combinación paramétrica particular reflejada en la figura 10 ilustra un caso en el que simultáneamente la eficacia de encapsulación es baja o nula (expulsión del núcleo) y se produce desaprovechamiento de fluido encapsulante (gotas simples). Por tanto, este es un régimen que debe ser particularmente evitado. En este punto, es muy importante señalar que en el trabajo de Vu et al. (2012) se obtiene un eficacia de encapsulación máxima para esta combinación, en contraste con nuestros resultados.

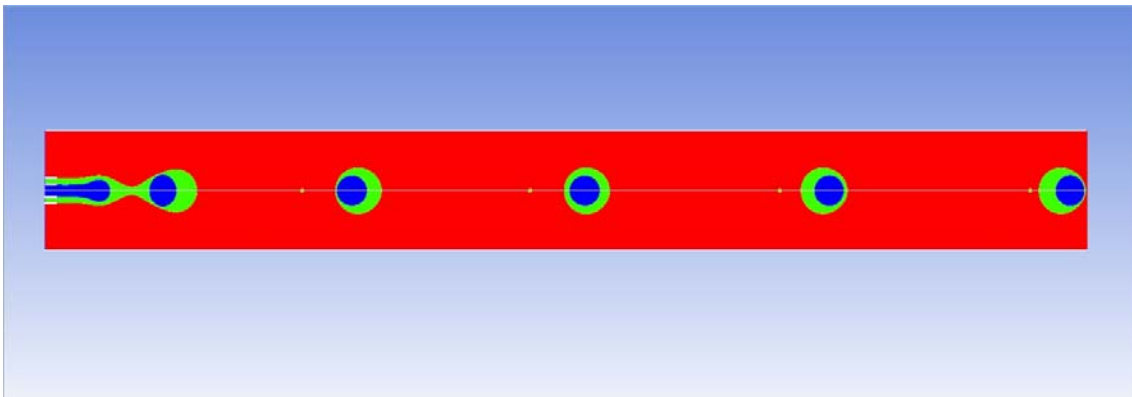
Aquí debemos reivindicar que nuestro estudio contempla un exhaustivo análisis paramétrico de la convergencia del método numérico (en particular la reconstrucción de la interfase), de tal manera que los casos aquí estudiados y reportados son el resultado final producto de una convergencia comprobada, con un margen de error que puede considerarse despreciable. Así pues, este trabajo pone de manifiesto la importancia fundamental que tiene el conocimiento y control del método numérico y su convergencia en la obtención de resultados globales (rendimientos, eficacias...) de un proceso macroscópico que tanto depende de fenómenos no lineales enormemente complejos a nivel microscópico.

La transición entre la fase mixta (gotas simples y compuestas) y el modo dripping tiene lugar en un valor no especificado entre 0.2 y 0.5 en sintonía con lo propuesto por Vu et al. (2013), que sugieren un valor aproximado de 0.4. Queda patente el efecto principal que ejerce en el sistema la modificación del ratio de tensión superficial, ya que al disminuir éste, la tensión superficial entre los fluidos interno e intermedio aumenta sustancialmente y en consecuencia la distancia de rotura de gotas para el chorro externo se reduce hasta converger ambos chorros en el modo dripping.



**Fig 11.** Microencapsulación completa en modo mixto para  $\sigma_{21} = 0.5$

Un hecho interesante es el bajo nivel de polidispersión en el tamaño de las gotas encapsuladas para un  $\sigma_{21}$  fijado. Aunque para ratios de tensión superficial bajos, como se explicó para la figura 10, se forman gotas simples dando lugar a una no-uniformidad en el tamaño de las gotas que afecta al rendimiento de producción final.



**Fig 12.** Microencapsulación completa en modo jetting para  $\sigma_{21} = 0.89$

En conclusión, esta combinación paramétrica estudiada pone de manifiesto que para una eficiencia de encapsulamiento máxima sin desaprovechamiento de fluido encapsulante se deben elegir relaciones de tensión superficial cercanas a 1.

#### 4.4. Efectos del ratio de velocidad $U_{21}$ de los fluidos interno e intermedio

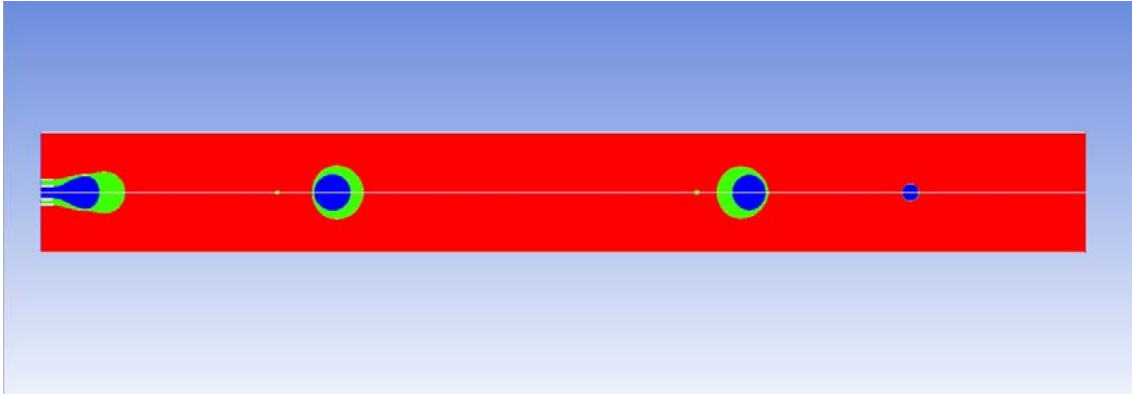
Las condiciones del flujo de esta sección se reflejan en la tabla siguiente:

$Re$	$We$	$\sigma_{21}$	$U_{31}$	$R_{21}$
5	0.3	1	1	2

**Tabla 4.** Propiedades del flujo para el caso  $U_{21}$  variable

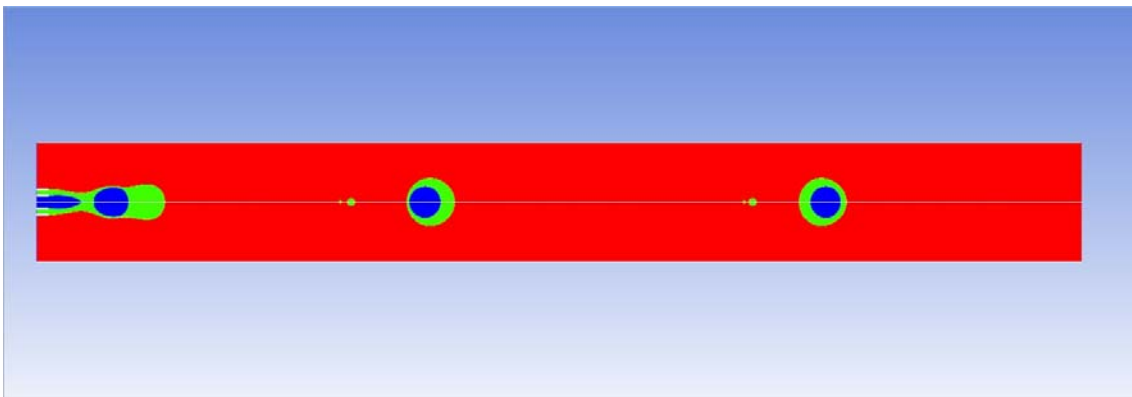
Las figuras 13, 14, 16 y 17 muestran la formación y rotura de un chorro capilar compuesto mientras  $U_{21}$  varía en un rango comprendido entre 0.79 y 3.16. Para un valor

bajo de  $U_{21}$  (fig 13), el chorro compuesto produce gotas compuestas *single-core* en el modo dripping para los chorros interno e intermedio. El aumento de  $U_{21}$ , fijando el valor de  $U_1$ , se traduce en un aumento del caudal neto que introducimos en el sistema. En consecuencia, se producirá una divergencia en el tamaño de las gotas interna y externa que a continuación se ilustrará más detalladamente.



**Fig 13.** Microencapsulación completa en modo dripping para  $U_{21} = 0.79$

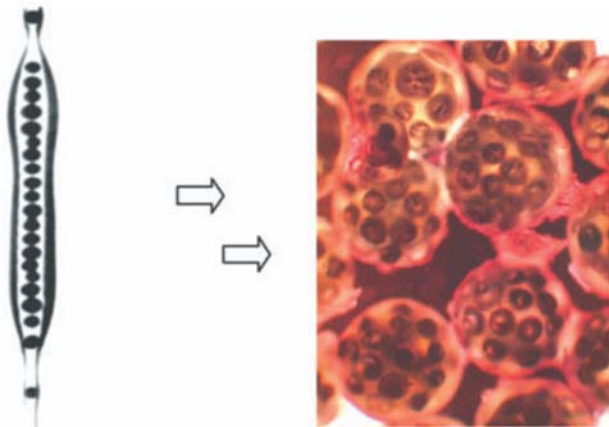
Aumentar  $U_{21}$  provoca un adelgazamiento en el chorro interno y un estrechamiento en el chorro intermedio. Este efecto se acentúa a partir del valor 1.41, tras el cual el estrechamiento e inercia del chorro interno e intermedio provoca que estos entren en modo jetting. La transición no es repentina y comienza a partir del valor ya mencionado.



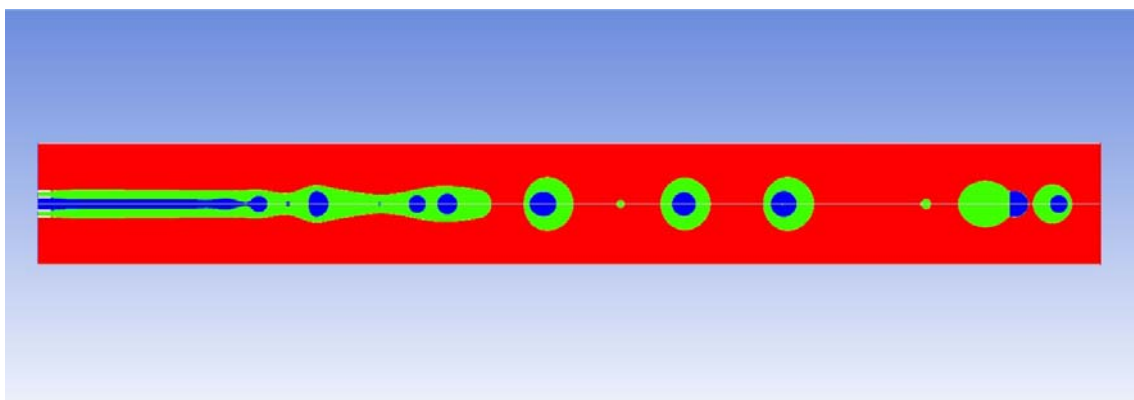
**Fig 14.** Microencapsulación completa en modo dripping para  $U_{21} = 1.41$

Un incremento en  $U_{21}$  resulta en un incremento de las distancias de rotura del chorro interno e intermedio. Sin embargo, el diámetro de la gota interna decrece cuando se incrementa  $U_{21}$ . Esto es debido al mayor gradiente de velocidades en la superficie, y consecuentemente las mayores fuerzas viscosas causan que el chorro interno rompa en gotas más pequeñas en menores tiempos de rotura. Esto aumenta el número de gotas internas dentro de la gota compuesta y aumenta el diámetro de la gota externa (fig 16). Este fenómeno promueve la formación de gotas compuestas multi-core. Este modo corresponde a grandes diferencias en el tiempo de formación de gotas entre los chorros interno e intermedio. Existe una cierta dispersión de tamaños en el chorro interno, que se reflejaría en la dispersión de la gota externa.

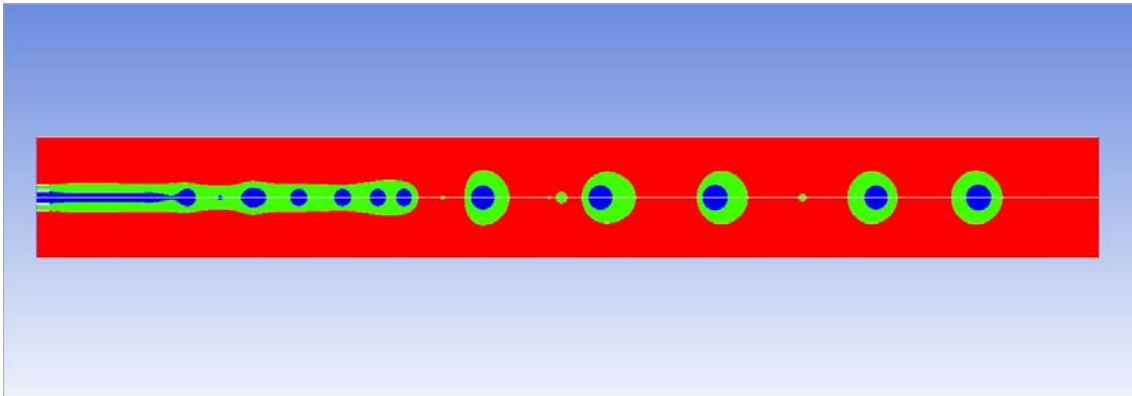
Sin embargo, es importante señalar aquí que la hipótesis geométrica utilizada en este estudio (simetría axial) restringe todo grado de libertad que lleve a una rotura de esta simetría axial. Como consecuencia de esto, esta simulación conduce a que las pequeñas gotas internas producidas por jetting coalezcan rápidamente entre sí antes de la rotura de la gota externa, obteniéndose finalmente un solo núcleo, en contraposición con los resultados reportados por Bocanegra, Sampedro y Gañán-Calvo (2005), y Martín-Banderas et al. (2005). Se puede observar en la figura 16 como el resultado después de la rotura del chorro externo es un reparto tridimensional de las gotas pequeñas provenientes de la rotura del chorro interno en el interior de una sola gota final. De nuevo, insistimos aquí en que la restricción del grado de libertad radial necesario para el descentramiento de la final de gotas pequeñas antes de que se produzca su coalescencia es la responsable de esta gran diferencia entre los resultados experimentales y la simulación numérica.



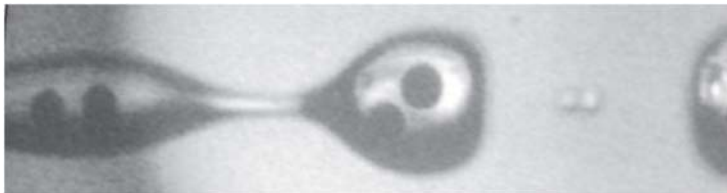
**Fig 15.** Microfotografía del proceso de rotura de un chorro compuesto en condiciones que dan lugar a capsulas multi-vesiculas (fluido interno: tinta azul Parker Quink; fluido encapsulante: fotopolímero SK9; fluido ambiente: aceite de silicona 5CP). Bocanegra et al. (2005); Martín-Banderas et al. (2005).



**Fig 16.**  $U_{21} = 3.16$ . Modo de reconstrucción de la interfase geo-reconstruct



**Fig 17.**  $U_{21} = 3.16$ , modo de reconstrucción de la interfase HRIC



**Fig 18.** Microfotografía de un caso experimental aproximadamente correspondiente a la figura 16. Obsérvese cómo las dos vesículas se descentran incluso antes de producirse la rotura del chorro externo, evitándose así su coalescencia.

La solución para  $U_{21} = 3.16$ , correspondiente al modo multi-core, tras probar varios métodos VOF y refinar el mallado no fue posible encontrar convergencia de las condiciones macroscópicas finales de las gotas en la simulación. El método geo-reconstruct se utiliza cuando se está interesado en la precisión temporal del estado transitorio de la solución VOF. Es un método pesado en términos computacionales. Para la segunda simulación usamos un método menos costoso y que adicionalmente suaviza ligeramente los bordes en las superficies. No hubo se obtuvo el resultado buscado, sin embargo las diferencias en la distancia de rotura y tiempo de formación de las gotas compuestas son notables. Como nota adicional, la interfase de todas las simulaciones anteriores alcanzaba la estabilidad si en número de Courant era menor o igual a 1, para tiempos de simulación de  $\delta t = 0.02$ . Este tiempo no varió apreciablemente entre los diferentes casos, pues es la tensión superficial el parámetro más determinante para fijar este parámetro.

En definitiva, se puede afirmar que el problema radicó en la condición de axilsimetría impuesta en todas las simulaciones de este trabajo (durante un experimento real con las mismas condiciones obtendríamos un claro ejemplo de jetting multi-core). Así como el uso de un método numérico que busca soluciones estacionarias da lugar a no-convergencias cuando el sistema a simular es inestable y su solución final inherentemente no-estacionaria, en nuestro caso el uso de una hipótesis de simetría axial lleva finalmente a la no-convergencia en casos en los que la física del problema daría



como solución configuraciones no-axilsimétricas. Aquí es necesario considerar el ratio de dos tiempos característicos que entran en conflicto: el tiempo característico de coalescencia de las vesículas (tiempo de rotura del film intermedio), y el tiempo característicos del pinch-off en la rotura del chorro externo (tiempo capilar correspondiente a la tensión superficial del chorro externo).

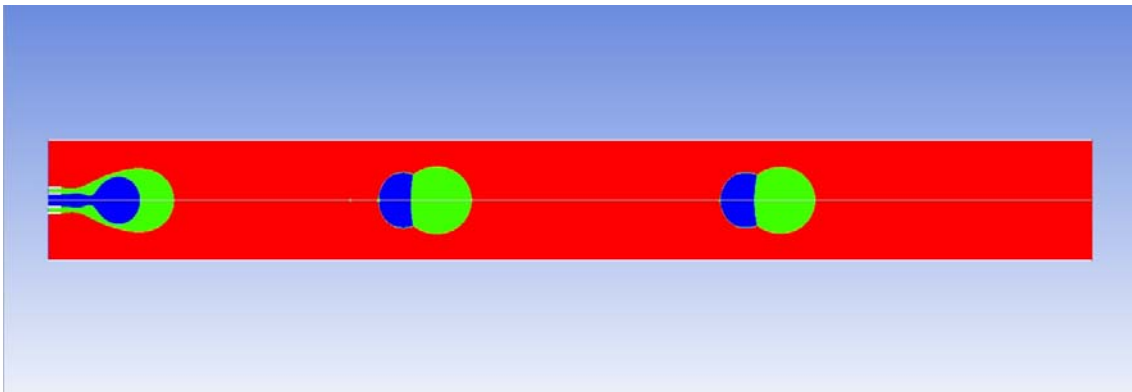
#### 4.4. Efectos del ratio de velocidad $U_{31}$ de los fluidos interno y externo

Las condiciones del flujo de esta sección se reflejan en la tabla siguiente:

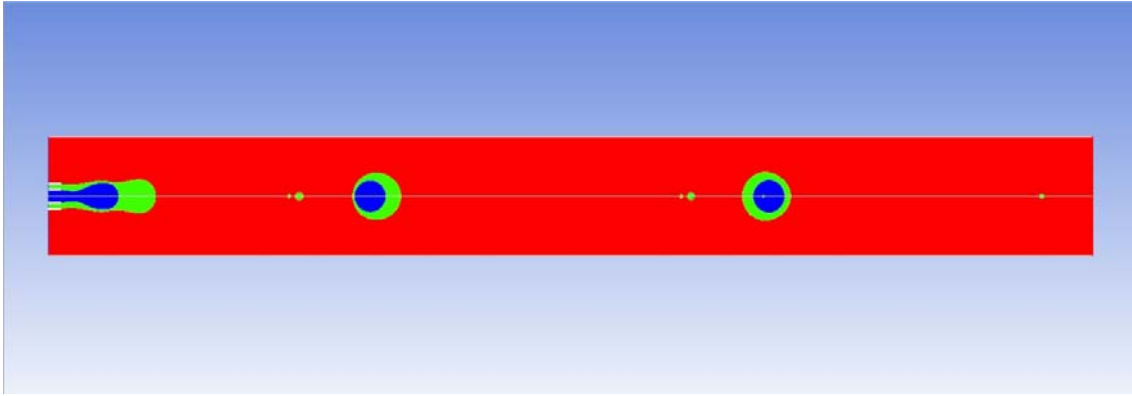
$Re$	$We$	$\sigma_{21}$	$U_{21}$	$R_{21}$
5	0.3	1	1	2

**Tabla 5.** Propiedades del flujo para el caso  $U_{31}$  variable

Al contrario que para  $U_{21}$ , incrementar  $U_{31}$ , reduce el tamaño de las gotas compuestas como se muestra en las figuras 19, 20, 21 y 22. Para un valor bajo del ratio  $U_{31} = 0.4$  (fig 19), el chorro compuesto rompe en gotas compuestas single-core en modo dripping. El resultado obtenido en la simulación no es el esperado, pues el núcleo es expulsado, un problema persistente para valores altos de tensión superficial unidos a bajas velocidades. Para un valor superior de  $U_{31} = 4$ , el chorro compuesto forma gotas compuestas debido a la influencia del modo dripping del chorro interno y gotas simples en el modo jetting (fig 21). Este complejo modo de rotura ya fue explicado previamente en la figura 10. Sin embargo, para un valor muy alto de  $U_{31} = 10$  (fig 22), la fuerza viscosa del fluido externo se incrementa aún más, promoviendo el estrechamiento del chorro compuesto hasta formar un largo filamento del cual gotas con un tamaño similar al inyector interno se desprenden de la punta del chorro compuesto debido a inestabilidad capilar (Rayleigh, 1879).



**Fig 19.** Microencapsulación incompleta en modo dripping para  $U_{31}=0.4$

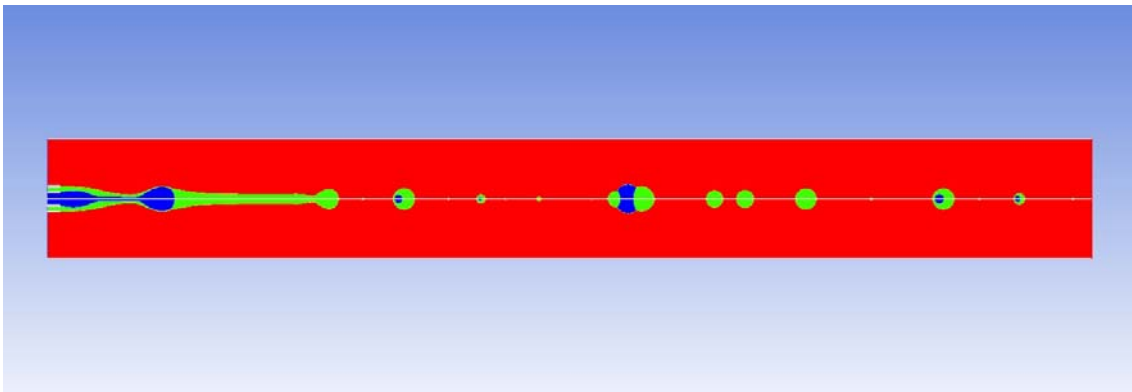


**Fig 20.** Microencapsulación completa en modo dripping para  $U_{31} = 1.58$

Con el objetivo de garantizar la estabilidad durante las simulaciones, el tiempo de paso para este apartado debía ser ajustado para cada configuración pues a diferencia del caso  $U_{21}$ , las diferencias en los gradientes de velocidad eran más evidentes. El tiempo de paso está relacionado directamente con la velocidad a través de la celda del mallado para el método VOF:

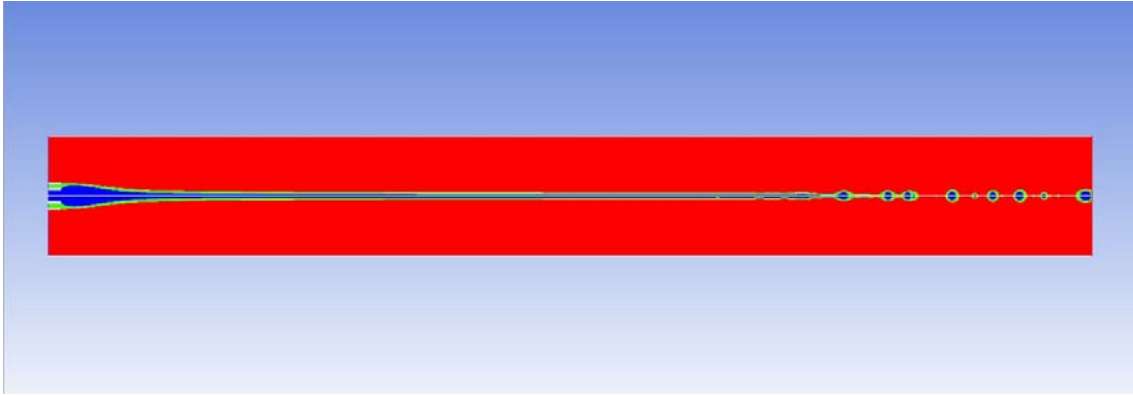
$U_{31}$	0.4	1.58	4	10
$\delta t$	0.025	0.02	0.01	0.004

**Tabla 6.** Influencia del ratio de velocidades  $U_{31}$  en el tiempo de paso  $\delta t$ .



**Fig 21.** Microencapsulación parcial en modo mixto para  $U_{31} = 4$ .

Para aplicaciones en la industria de la encapsulación, la formación de gotas simples en el modo mixto dripping-jetting (fig 21) no es normalmente deseable debido al desaprovechamiento de materia prima o ingrediente encapsulante, y puede ser suprimida incrementado  $We$  como se mostró en la figura 11.



**Fig 22.** Microencapsulación completa en modo jetting para  $U_{31} = 10$

A medida que  $U_{31}$  avanza entre los valores 0.1 y 10, la distancia de rotura del chorro aumenta ligeramente durante el modo dripping, pero en un valor comprendido entre 5 y 6, repentinamente el modo mixto desaparece y la distancia de rotura se incrementa en un orden de magnitud. Y al contrario de lo que pasaba con el incremento de  $U_{21}$ , no se promueve la formación de gotas compuestas multi-core para esta configuración de parámetros.

# CONCLUSIONES

---

Durante el presente trabajo hemos aportado los resultados obtenidos apartir de una serie de simulaciones numéricas sobre la formación y rotura de chorros capilares compuestos en régimen laminar con el objetivo de contrastar y extender el trabajo presentado por Vu et al. (2012). A lo largo del desarrollo de este estudio nos hemos centrado fundamentalmente en recopilar y controlar una serie de condiciones para asegurar la absoluta veracidad en la convergencia y sensibilidad de los resultados obtenidos. Queremos remarcar el potencial comercial de esta tecnología, pues las configuraciones paramétrica aquí barridas, son ampliamente utilizadas en la industria farmacéutica, textil, alimentaria, entre otras; y conceptos utilizados y discutidos como el rendimiento de encapsulación requieren de un análisis exhaustivo de las simulaciones. El aprovechamiento del fluido encapsulante y su optimización son aspectos cruciales en el ámbito de la encapsulación comercial. La principal diferencia encontrada con el trabajo citado radica en su falta de contraste con experimentos reales en los cuales el rendimiento de encapsulación sea parcial o nulo. Son conocidos estos efectos indeseables en los procesos de encapsulación y no se muestran reflejados durante sus más de 100 simulaciones que cubren la totalidad de las transiciones dripping-jetting. Esto puede indicar una debilidad en el método utilizado a la hora de predecir efectos ya observados experimentalmente. Adicionalmente vimos necesario la propuesta de un criterio divergente al propuesto por Vu et al. para la clasificación del modo de rotura.

En contraste, hay que señalar ciertas limitaciones que nuestro método ha exhibido en ciertos procesos: la condición geométrica impuesta de axilsimetría reduce un grado de libertad que es fundamental para el correcto desarrollo de la encapsulación multivesicular, ya que se distribuyen los núcleos internos antes de la rotura del chorro encapsulante, además de un incremento exponencial en el gasto computacional relacionado con el aumento de la tensión superficial entre las diferentes fases.

Sin embargo, este trabajo abre futuras líneas de investigación: la necesidad de simular en 3D los casos sensibles a la axilsimetría para establecer un criterio óptimo para esos rangos paramétricos; y adicionalmente la posibilidad de investigar cómo pueden afectar los ratios de densidad y viscosidad a los modos de rotura del chorro compuesto en particular con respecto a varias configuraciones como líquido/líquido/líquido (Utada et al., 2005), líquido/líquido/gas (Hertz y Hermanrud, 1983) y gas/líquido/gas (Nadler et al., 2000).

# REFERENCIAS

---

Abate, A.R., Thiele, J., Weitz, D.A., 2011. One-step formation of multiple emulsions in microfluidics. *Lab Chip* 11, 253.

Aulisa, E., Manservigi, S., Scardovelli, R., Comput, J., 2003. \*\*\* *Physics* 188, 611.

Barrero, A., Loscertales, I. G., 2007. Micro- and Nanoparticles via capillary flows. *Annu. Rev. Fluid Mech* 39, 89-106.

Boh, B., & Kornhasuer, A., 2003. Reducing the toxicity of pesticides. *Analytica Chimica Acta* 33, 281–284.

Chang, C. P., Yamamoto, T., Kimur, M., Sato, T., Ichikawa, K., Dobashi, T., 2003. Release characteristics of an azo dye from poly(ureaurethane) microcapsules. *Journal of Controlled Release* 86, 207–211.

De la Mora, J. F., 2007. The fluid dynamics of Taylor cones. *Annu. Rev. Fluid Mech* 39, 217-243.

Denn, M.M., 1980. Continuous drawing of liquids to form fibers. *Annu. Rev. Fluid.Mech.* 12, 365–387.

Fan, Y. F., Zhang, X. X., Wang, X. C., Li, J., Zhu, Q. B., 2004. Super-cooling prevention of microencapsulated phase change material. *Thermochimica Acta* 413, 1–6.

Gañán-Calvo, A. M., 1998. Generation of steady liquid microthreads and micron-sized monodisperse sprays in gas streams. *Phys. Rev. Lett.* 80, 285-288.

Gañán-Calvo, A. M., Gordillo, J. M., 2001. Perfectly monodisperse microbubbling by capillary flow focusing. *Phys. Rev. Lett.* 87, 274501.

Giroud, F., Pernot, J. M., Brun, H., Pouyet, B., 1995. Optimization of microencapsulation of acrylic adhesives. *Journal of Microencapsulation* 12, 389–400.

Gisbert, J., Ibañez, F., Bonet, M., Monllor, P., Díaz, P., Montava, I., 2009. Increasing hydration of the epidermis by microcapsules in sterilized products. *Journal of Applied Polymer Science* 113(4), 2282–2286.

Harvie, D. J. E., Fletcher, D. F., 2000. \*\*\* *Journal of Computational Physics* 162, 1.

Hawlder, M. N. A., Uddin, M. S., Khin, M. M., 2003. Microencapsulated PCM thermal-energy storage system. *Applied Energy* 74, 195–202.

Heinrich, P., 1991. \*\*\* *International Journal of Fluid Engineering.* 4, 403.

- Herrada, M.A., Montanero, J.M., Ferrera, C., Gannan-Calvo, A.M., 2010. Analysis of the dripping to jetting transition in compound capillary jets. *J. Fluid Mech.* 649, 523–536.
- Hirt, C. W., Nichols, B. D., Comput, J., 1984. \*\*\**Physics* 39, 201.
- Homma, S., Koga, J., Matsumoto, S., Song, M., Tryggvason, G., 2006. Breakup mode of an axisymmetric liquid jet injected into another immiscible liquid. *Chem. Eng. Sci.* 61, 3986–3996.
- Issa, R. I., 1986. \*\*\**Journal of Computational Physics* 62, 40.
- Kapusniak, J., Tomasik, P., 2006. Lipid microencapsulation in starch. *Journal of Microencapsulation* 23, 341–348.
- Kothe, D. B., Rider, W. J., 1995. \*\*\* *Fluid Dynamics* 3, 19.
- Lafaurie, B., Nardone, C., Scardovelli, R., Zaleski, S., Zanetti, G., 1994. *Journal of Computational Physics* 113, 134.
- Lee, S.Y., Snider, C., Park, K., Robinson, J.P., 2007. Compound jet instability in a microchannel for mononuclear compound drop formation. *J. Micromech. Microeng.* 17, 1558–1566.
- Li, X., Shen, J., 2001. Experiments on annular liquid jet breakup. *Atomization Sprays* 11, 557–573.
- Li, S., Lewis, J. E., Stewart, N. M., Qian, L., Boyter, H., 2008. Effect of finishing methods on washing durability of microencapsulated aroma finishing. *Journal of the Textile Institute* 99(2), 177–183.
- Long, Y., York, D., Zhang, Z., & Preece, J. A., (2009). Microcapsules with low content of formaldehyde: Preparation and characterization. *Journal of Materials Chemistry* 19, 6882–6887.
- Loscertales, I.G., Barrero, A., Guerrero, I., Cortijo, R., Marquez, M., Gannan-Calvo, A.M., 2002. Micro/nano encapsulation via electrified coaxial liquid jets. *Science* 295, 1695–1698.
- Loscertales, I.G., Barrero, A., Márquez, M., Spretz, R., Velarde-Ortiz, R., Larsen, G., 2004. Electrically forced coaxial nanojets for one-step hollow nanofiber design. *J. Am. Chem. Soc.* 126, 5376–5377.
- Madene, A., Jacquot, M., Scher, J., Desobry, S., 2006. Flavour encapsulation and controlled release – A review. *International Journal of Food Science & Technology*, 41 (1), 1–21.
- Mathiowitz, E., Jacob, J.S., Jong, Y.S., Carino, G.P., Chickering, D.E., Chaturvedi, P., Santos, C.A., Vijayaraghavan, K., Montgomery, S., Bassett, M., Morrell, C., 1997.

Biologically erodable microspheres as potential oral drug delivery systems. *Nature* 386, 410–414.

Monllor, P., Capablanca, L., Bonet, M., Gisbert, J., Díaz, P., Montava, I., 2010. Improvement of microcapsules adhesion to fabrics. *Textile Research Journal* 80(7), 631–635.

Nelson, G., 2001. Microencapsulates in textile finishing. *Review of Progress in Coloration and Related Topics* 31, 57–64.

Nelson, G., 2002. Application of microencapsulation in textiles. *International Journal of Pharmaceutics* 242, 55–62.

Paya, J.G., Bonet, M.A., Aboy, P.M.R., Perez, P.M., 2010. Insect Repellent Textile. *US Patent 2010/0183690 A1*.

Radev, S., Tchavdarov, B., 1988. Linear capillary instability of compound jets. *Int. J. Multiphase Flow* 14, 67–79.

Rayleigh, L., 1879. On the capillary phenomena of jets. *Proc. Roy. Soc. Lond.* 29, 71–97.

Suryo, R., Doshi, P., Basaran, O.A., 2006. Nonlinear dynamics and breakup of compound jets. *Phys. Fluids* 18, 082107\_1–13.

Tchavdarov, B.M., Minev, P.D., Radev, S.P., 1994. Numerical analysis of compound jet disintegration. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 118, 121–132.

Sawada, K., Urakawa, H., 2005. Preparation of photosensitive color-producing microcapsules utilizing in situ polymerization method. *Dyes and Pigments* 65, 45–49.

Stolnik, S., 1995. Long circulating microparticulate drug carriers. *Advanced Drug Delivery Reviews* 16, 195–214.

Tanguy, S., Berlemont, A., 2005. *International Journal Multiphase Flow* 31, 1015.

Tomiyama, A., Sou, A., Minagawa, H. T., Sakaguchi, 1993. *International Journal of Japan Society of Mechanical Engineers Ser. B* 36, 51.

Unverdi, S. O., Tryggvason, G., Comput, J., 1992. \*\*\* *Physics* 100, 25.

Utada, A.S., Lorenceau, E., Link, D.R., Kaplan, P.D., Stone, H.A., Weitz, D.A., 2005. Monodisperse double emulsions generated from a microcapillary device. *Science* 308, 537–541.

Van Leer, B., 1979. \*\*\* *Journal of Computational Physics* 32, 101.

Wang, C. X., Chen, S. L., 2005. Aromachology and its application in the textile field. *Fibres & Textiles in Eastern Europe* 13(6(54)), 41–44.

Wegmuller, R., Zimmermann, M. B., Buhr, V. G., Windhab, E. J., Hurrell, R. E., 2006. Development, stability, and sensory testing of microcapsules containing iron, iodine, and vitamin A for use in food fortification. *Journal of Food Science* 71, s181–s187.

Youngs, D. L., 1982. Geo-Reconstruct numerical method. *Numerical methods for fluid dynamics 1*, 41–51.

Zhang, Z., Saunders, R., & Thomas, C.R., 1999. Mechanical strength of single microcapsules determined by a novel micromanipulation technique. *Journal of Microencapsulation* 16(1), 117–124.

Zhang, X., Tão, X., Yick, K., Wang, X., 2004. Structure and thermal stability of microencapsulated phase-change materials. *Colloid and Polymer Science* 282, 330–336.

Zhou, C., Yue, P., Feng, J.J., 2006. Formation of simple and compound drops in microfluidic devices. *Phys. Fluids* 18, 092105\_1-14.

---