



Escola Politécnica Superior

**Trabajo Fin de Máster
CURSO 2018/2019**

ESTUDIO NUMÉRICO DEL PROCESO DE ESCURRIDO NEUMÁTICO EN GALVANIZACIÓN

Máster Universitario en Ingeniería Industrial

ALUMNO

David Barreiro Villaverde

TUTORES

Anne Gosset

Marcos Lema Rodríguez

FECHA

JULIO 2019

RESUMEN

En este trabajo fin de máster se lleva a cabo un estudio numérico del proceso de escurrido neumático ("jet wiping"). Este método es utilizado en el proceso de producción de acero galvanizado en caliente, donde una lámina de acero se sumerge de forma continua en un baño de zinc fundido, arrastrando con ella una capa de líquido que es la que forma el revestimiento. El grosor de esta capa es excesivo, por lo que se reduce mediante la acción de un chorro horizontal de aire. Se trata de un proceso inestable que resulta en la generación de ondulaciones que afectan a la calidad del producto final. Para el análisis numérico de dicha configuración física se hace uso de métodos de dinámica de fluidos computacional (CFD). Se han utilizado modelos de alta fidelidad basados en simulaciones 3D bifásicas, así como otras alternativas simplificadas de menor coste computacional orientadas a su utilización en la industria. Este es el caso de un modelo integral de película líquida y un modelo teórico unidimensional basado en la teoría de la lubricación. Los resultados se confrontan con una extensa serie de datos experimentales obtenidos recientemente. Su análisis permite una mejor comprensión de los fenómenos físicos que hay en el origen de las ondulaciones.

Neste traballo fin de mestrado lévase a cabo un estudo numérico do proceso de escurrido pneumático ("jet wiping"). Este método é utilizado no proceso de produción de aceiro galvanizado en quente, onde unha lámina de aceiro somérxese de forma continua nun baño de zinc fundido, arrastrando con ela unha capa de líquido que é a que forma o revestimento. O grosor desta capa é excesivo, polo que se reduce por medio da acción dun chorro horizontal de aire. Trátase dun proceso inestable que resulta na xeración de ondulacións que afectan á calidade do produto final. Para a análise numérica de dita configuración física faise uso dos métodos de dinámica de fluídos computacional (CFD). Utilizáronse modelos de alta fidelidade baseados en simulacións 3D bifásicas, así coma outras alternativas simplificadas de menor coste computacional orientadas á súa utilización na industria. Este é o caso dun modelo integral de película líquida e un modelo teórico unidimensional baseado na teoría da lubricación. Os resultados confróntanse cunha extensa serie de datos experimentais obtidos recentemente. A súa análise permite unha mellor comprensión dos fenómenos físicos na orixe das ondulacións.

In this master thesis a numerical study of the jet wiping is carried out. This method is used in the production process of hot galvanized steel and consists of a steel strip immersed in a molten zinc bath, dragging a layer of liquid that is the coating. The thickness of this layer is excessive, so it is reduced by the action of a horizontal plane gas jet. This is an unstable process that results in the generation of undulations that affect the quality of the final product. Computational fluid dynamics (CFD) is employed for the numerical analysis. High fidelity models based on 3D two-phase simulations, as well as other computational less expensive alternatives are used. This is the case of an integral liquid film model and a theoretical unidimensional model based on the lubrication theory. The results are confronted to an extensive experimental dataset recently collected. The analysis allows a better understanding of the physical phenomena at the origin of undulations.



Escola Politécnica Superior

**TRABAJO FIN DE MÁSTER
CURSO 2018/2019**

ESTUDIO NUMÉRICO DEL PROCESO DE ESCURRIDO NEUMÁTICO EN GALVANIZACIÓN

Máster Universitario en Ingeniería Industrial

Documento 1

MEMORIA

Índice

Resumen	2
1 Introducción	8
1.1 Motivación industrial	8
1.2 Objetivos.....	10
2 Modelado numérico.....	11
2.1 Dinámica de fluidos computacional (CFD)	11
2.1.1 Algoritmos de acoplamiento presión/velocidad	12
2.1.2 Introducción a OpenFOAM	13
2.2 Modelo 1D	14
2.3 Modelo integral de película líquida de OpenFOAM	17
2.4 Modelo 3D VOF LES	20
2.4.1 Modelado multifásico. Volume of Fluid (VOF)	20
2.4.2 Modelado de la turbulencia.....	21
2.5 Correlaciones para los actuadores de escurrido	23
3 Simulaciones numéricas	26
3.1 Simulaciones 3D VOF LES.....	26
3.2 Simulaciones mediante modelo integral.....	31
4 Procesado de resultados	32
4.1 Visualización gráfica	32
4.2 Procesado	35
4.2.1 Toma de datos.....	35
4.2.2 Preparación y filtrado.....	36
4.2.3 Extracción de parámetros de interés.....	38
5 Resultados.....	45
5.1 Datos experimentales para la validación.....	45
5.2 Simulaciones 3D VOF LES.....	47
5.2.1 Caracterización del comportamiento del chorro de gas.....	48
5.2.2 Caracterización del comportamiento de la fase líquida	51
5.2.3 Influencia de la geometría del inyector.....	56
5.3 Simulaciones mediante modelo integral.....	58
5.3.1 Consideraciones acerca de los actuadores de escurrido	58
5.3.2 Resultados.....	60
6 Conclusiones y perspectivas futuras	66

Bibliografía.....	68
-------------------	----

Índice de figuras

Figura 1: Esquema del proceso de escurrido neumático (a) junto con una imagen del proceso en una línea real de galvanizado (b). [1].....	9
Figura 2: Representación esquemática de los parámetros que gobiernan el proceso de escurrido. [1]	9
Figura 3: Estructura de ficheros genérica de un caso en OpenFOAM. [15]	14
Figura 4: Esquema de la filosofía de cálculo del modelo integral de película líquido para un proceso de escurrido neumático en 1D.	17
Figura 5: Esquema de funcionamiento del algoritmo de reconstrucción de la superficie libre. [21].....	21
Figura 6: Esquema sobre los diferentes modelos de turbulencia en cálculos CFD. [22]	21
Figura 7: Esquema del desarrollo del chorro a la salida del inyector. [1]	24
Figura 8: Representación 3D del inyector A para su variante simétrica (a) y asimétrica (b).27	
Figura 9: Captura de pantalla del proceso de mallado en ANSYS ICEM CFD®.	27
Figura 10: Ejemplo de comportamiento del multigrading de blockMesh aplicado a la zona situada entre la salida del chorro de gas y la pared. En negro se resalta el dominio del bloque y las líneas verticales rojas resaltan las divisiones entre las regiones del mismo.	29
Figura 11: Resumen de las características principales de la malla y condiciones de contorno aplicadas para los cálculos 3D VOF LES.	29
Figura 12: Resultados del estudio de escalabilidad.	30
Figura 13: Resumen de las características principales de la malla y condiciones de contorno aplicadas para los cálculos con el modelo integral.	31
Figura 14: Flujo de trabajo para el procesado de resultados de las simulaciones.....	35
Figura 15: Esquema representativo de la ventana espacial de análisis.	38
Figura 16: Evolución espacio-temporal de la interfaz del líquido en el que se destacan los puntos de análisis para el análisis frecuencial de las ondas del runback y de la película final.	39
Figura 17: Mapa de densidad espectral de potencias adimensionalizada (\mathcal{H}) para la evolución temporal del espesor.	40
Figura 18: Densidad espectral de potencia adimensionalizada (\mathcal{H}) para cada una de las posiciones de análisis.....	40
Figura 19: Mapa de colores para el operador de correlación R en función de la distancia a la coordenada de referencia para el caso de la película final.	41
Figura 20: Mapa de colores para el operador de correlación R en función de la distancia a la coordenada de referencia para el caso del runback.	41
Figura 21: Comparativa de la señal temporal de espesores original con la misma filtrada. .42	
Figura 22: Evolución del operador R para la correlación cruzada entre las señales de espesor a $x=0.02$ y $x=0.04$ m.	43

Figura 23: Evolución del punto de correlación máxima en función de la distancia a $x=0.02$ m del que se puede obtener la velocidad de las ondas en la película final	43
Figura 24: Ejemplo de detección de máximos y mínimos sobre la señal de espesor.	44
Figura 25: Esquema del equipo de ensayo de escurrido neumático. [13]	45
Figura 26: Imagen obtenida en la realización del TR-PIV en la zona de impacto. [13].....	46
Figura 27: Reconstrucción experimental del campo de espesores mediante la metodología Light Absorption (LA) para el caso en el que $Z = 14,2$ y $\Delta PN = 875 Pa$. [13].....	47
Figura 28: Vista 2D del campo de velocidades en el gas (a) y reconstrucción 3D del líquido (b) con $Z=18$ mm y $P=425$ Pa para la variante asimétrica del inyector.	48
Figura 29: Comparativa entre los campos de velocidad promediados para el estudio numérico.	49
Figura 30: Comparativa entre los campos de velocidad promediados para el estudio experimental. [13].....	50
Figura 31: Evolución temporal (azul) y promedio acumulado (rojo) para una señal temporal de espesores.....	51
Figura 32: Mapa espacio-temporal de espesores para los diferentes casos de estudio.....	53
Figura 33: Mapa de densidad espectral de potencias adimensionalizada (\mathcal{H}) para la evolución temporal del espesor para los diferentes casos de estudio.	54
Figura 34: Densidad espectral de potencia adimensionalizada (\mathcal{H}) para las señales temporales numéricas de espesor en el runback (rojo) y película final (azul).	55
Figura 35: Densidad espectral de potencia (\mathcal{H}) para las señales temporales experimentales de espesor en el runback (rojo) y película final (negro). [13]	56
Figura 36: Comparativa del campo de velocidades promediado para la variante asimétrica (a) y simétrica (b) para $Z = 14,2$ y $\Delta PN = 425 Pa$	57
Figura 37: Mapa espacio-temporal de espesores para la variante asimétrica (a) y simétrica (b) para $Z = 14,2$ y $\Delta PN = 425 Pa$	57
Figura 38: Comparativa de los perfiles de espesores obtenidos con el modelo 1D con la distribución de esfuerzo cortante obtenida mediante las correlaciones propuestas (línea roja) y sin esfuerzo cortante (azul) con $Z=18$ mm y $\Delta PN=425$ Pa.....	59
Figura 39: Comparativa entre los perfiles de presión promediados en la pared (azul) y en la interfaz (rojo) con $Z=18$ mm y $\Delta PN=425$ Pa.	59
Figura 40: Comparativa entre las correlaciones propuestas y los perfiles obtenidos en la pared con la película líquida (a) y sin la película líquida (b).....	60
Figura 41: Evolución del perfil de espesores para el momento inicial y final de la rampa de presión sobre placa plana horizontal.	62
Figura 42: Evolución de la película arrastrada por el substrato para un caso en el que el flujo es subcrítico (a) y supercrítico (b).....	63
Figura 43: Evolución temporal del perfil de espesores para el escurrido neumático calculado mediante el modelo integral de película líquida inicializado con el modelo 1D.	63
Figura 44: Evolución temporal del perfil de espesores para el escurrido neumático calculado mediante el modelo integral de película líquida inicializado con un flujo subcrítico adherido al substrato.	64

Índice de tablas

Tabla 1: Resumen de las características de los casos a estudiar.....	26
Tabla 2: Comparativa de los espesores para el estudio experimental y numérico.....	51
Tabla 3: Comparativa de las amplitudes para el estudio experimental y numérico.....	52

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Motivación industrial

El objeto de estudio de este trabajo fin de máster es el análisis numérico de un proceso conocido como “jet wiping” o escurrido neumático por su traducción al castellano. Es utilizado en multitud de aplicaciones en la industria del revestimiento de superficies entre las que se destacan la producción de películas fotográficas, la industria del papel y la galvanización en caliente, siendo esta última en la cual se centra el presente estudio.

En siderurgia los revestimientos son ampliamente utilizados para proteger el producto final contra la corrosión. En la fabricación del acero, la galvanización consiste en un sustrato ferroso que se protege con una capa de zinc. La galvanización en caliente es la técnica más común en la actualidad, en la que el sustrato sólido pasa a través de un baño de zinc fundido a una temperatura de unos 460 °C. En el proceso de deposición del zinc, no solo es el recubrimiento el que protege la lámina de acero, sino que se producen una serie de reacciones químicas que modifican la estructura interna del material. De esta forma, se generan aleaciones hierro-zinc sobre las que se deposita una capa externa de zinc puro que hace que mejore la resistencia mecánica, así como su comportamiento en ambientes corrosivos. Esto sucede debido a que la capa de zinc actúa como ánodo en el proceso electroquímico de corrosión, sufriendo la corrosión antes que el acero y por tanto protegiéndolo ante este fenómeno.

Las bobinas de acero se recubren en un proceso continuo, de forma que el sustrato va avanzando por la línea de galvanizado. Después de la inmersión en el baño de zinc líquido, el acero está recubierto por una película bastante gruesa, donde no todo el material arrastrado es necesario. Con el fin de reducir el coste, el espesor final de recubrimiento ha de ser controlado. La técnica de escurrido neumático se usa con este propósito, empleando un chorro de aire que retira el exceso de líquido de la lámina de acero al tiempo que esta se extrae del baño de zinc, tal y como aparece reflejado en la Figura 1 (a). La aplicación del chorro de aire genera dos regiones completamente diferenciadas: desde el punto de impacto aguas abajo se genera un flujo ascendente de líquido de espesor reducido que se conoce como película final; mientras que aguas arriba se desarrolla un flujo que tiene la particularidad de estar compuesto por una parte ascendente debida al movimiento del sustrato y otra descendente provocada por la retirada del exceso de espesor al cual se le denomina como runback. En la Figura 1 (b) se puede ver una imagen del proceso industrial. Para hacerse una idea del ahorro que implica la acción del chorro de gas, la lámina líquida pasa de unos 200 – 400 μm antes del escurrido, a unos 5 – 20 μm en el producto final, suponiendo un 90 – 95 % de ahorro en la cantidad de zinc necesario.

Este método ofrece ciertas ventajas como que no haya contacto físico entre elementos durante el escurrido y un bajo coste energético comparado con otras alternativas como las basadas en fenómenos electromagnéticos. Prueba de ello es que un 83% del acero galvanizado se produce por medio de la técnica de escurrido neumático, mientras que el 17% restante corresponde a las alternativas basadas en electromagnetismo. Por lo contrario, existen limitaciones en términos de velocidad de la línea por la generación de salpicaduras y ondulaciones en el revestimiento final. Estas ondulaciones son clave en términos de calidad superficial para productos en los que el acero galvanizado está a la vista, y que suponen el origen del interés que ha suscitado gran parte de las investigaciones que tratan de entender los fenómenos subyacentes en el proceso de escurrido neumático, así como el planteamiento de estrategias de control para evitarlo.

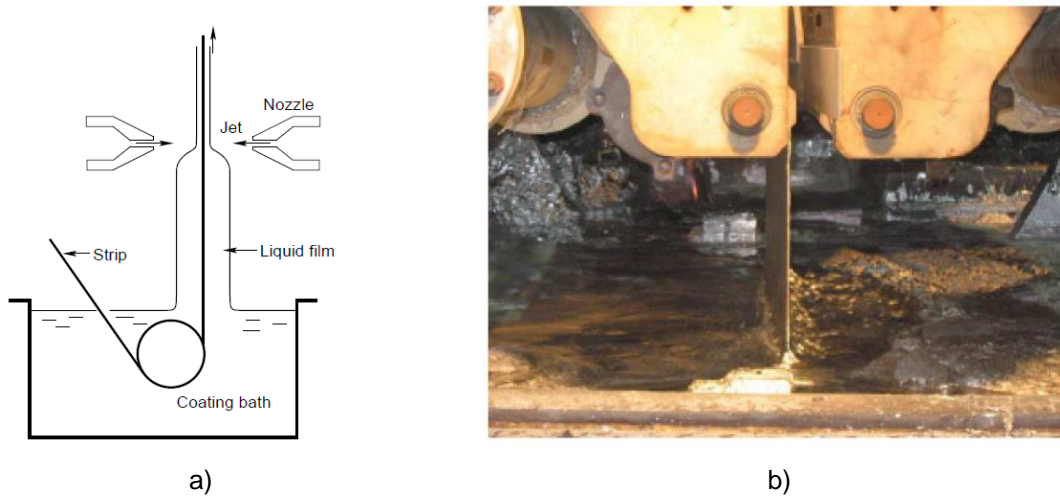


Figura 1: Esquema del proceso de escurrido neumático (a) junto con una imagen del proceso en una línea real de galvanizado (b). [1]

En la Figura 2 se presentan los parámetros principales que gobiernan el proceso: la velocidad del sustrato U_s , la presión estática en la cámara de remanso del inyector ΔP_N , la apertura del inyector d y la distancia entre el inyector y el sustrato Z . La teoría identifica dos factores clave en el trabajo realizado por el gas sobre el líquido. Estos se conocen como actuadores de escurrido (wiping actuators) y son la distribución de gradiente de presiones y el esfuerzo cortante sobre la película a lo largo del sustrato. Estos provocan una distribución de espesores $h(x, t)$, que se caracteriza por un espesor medio en la película final h_f y en runback h_R . En esta misma imagen se puede ver una representación de las ondulaciones que acaban de ser presentadas, así como de las diferencias entre el flujo en la película final y runback.

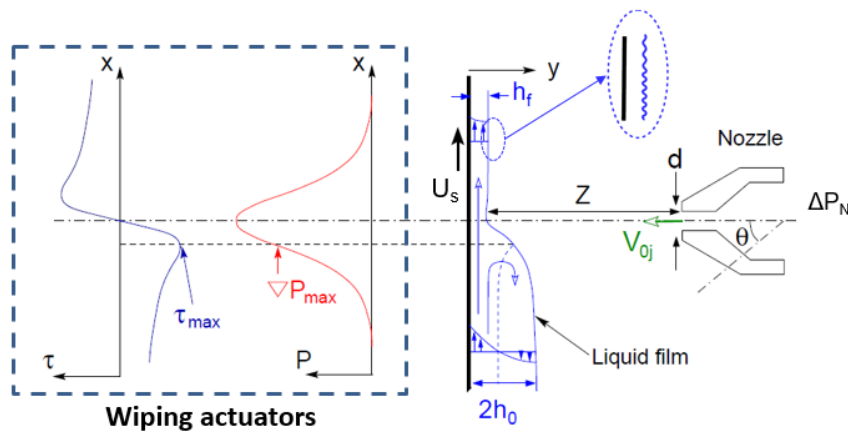


Figura 2: Representación esquemática de los parámetros que gobiernan el proceso de escurrido. [1]

El desarrollo del proceso ha sido soportado por un gran número de investigaciones analíticas y experimentales que hicieron posible la formulación de modelos físicos simplificados [2]–[4]. Estos modelos están todos basados en la formulación de lubricación para la película líquida y una hipótesis de acoplamiento de un solo sentido con el flujo de gas. Esto es, se supone que el chorro impactante no se ve afectado por la presencia de la capa líquida, y que el fenómeno de escurrido se reduce a la acción de los actuadores de escurrido.

Varios estudios numéricos y experimentales [3]–[6] han permitido validar estos modelos para predecir el espesor medio final del revestimiento y, debido a su simplicidad, se han convertido en las herramientas fundamentales utilizadas en la actualidad para el control y la operación de líneas industriales [7].

Como ya se ha adelantado, el proceso de escurrido neumático es intrínsecamente inestable y no se puede caracterizar completamente con parámetros promediados. El fenómeno no estacionario más importante de este proceso es la formación de irregularidades en el revestimiento final, lo que se conoce como ondulación. Este fenómeno deteriora la calidad del producto final y constituye en la actualidad el mayor problema de la galvanización. Varias hipótesis en cuanto al origen del fenómeno han sido formuladas: Gosset [1] descarta el papel de la vibración del sustrato en la inestabilidad. Tu y Ellen [8] y Hocking et al. [9] investigan la inestabilidad hidrodinámica intrínseca de la película líquida y concluyen que las pequeñas perturbaciones debidas al chorro impactante no son capaces de generar las frecuencias de ondas observadas experimentalmente. La hipótesis de un acoplamiento entre la película líquida y el chorro impactante se formula por primera vez por Gosset [1]. Esta se confirma mediante simulaciones numéricas 3D y bifásicas de Myrillas et al. [10] y Pfeiler et al. [11]. En dos trabajos experimentales recientes [12], [13], se explica parte del fenómeno: las ondas de gran amplitud que se forman en el runback contribuyen a confinar periódicamente el flujo de gas que proviene de la separación del chorro impactante. Este confinamiento induce la formación de una gran recirculación debajo del chorro, por lo que la presencia de esta zona de baja presión provoca el desplazamiento periódico del chorro hacia abajo. Esta desviación afecta temporalmente a la eficacia del escurrido y se forma una onda sobre la película arrastrada aguas abajo.

1.2 Objetivos

El objetivo de este trabajo es alcanzar una mayor comprensión de los fenómenos físicos que gobiernan el proceso de escurrido neumático haciendo uso de herramientas numéricas, así como probar las capacidades de distintos modelos numéricos para representar el proceso de escurrido neumático en base a una comparativa con una extensa base de datos de estudios experimentales [12], [13].

Por un lado, se consideran modelos 3D de alta fidelidad con un alto coste computacional basados en la metodología Volume of Fluid (VOF) para el problema multifásico y Large Eddy Simulation (LES) para el cálculo turbulento del comportamiento del gas, clave en la formación de las ondulaciones según las teorías más recientes.

Por otro lado, se propone hacer uso de un modelo 1D basado en las hipótesis de lubricación y un modelo integral de película líquida que tienen en común que son aproximaciones de tipo “one-way”. Esto significa que la fase gas y la fase líquida no están acopladas. En estos modelos solo se estudia lo que ocurre en el líquido y la influencia del gas se modela por medio de los actuadores de escurrido. La ventaja de estos modelos respecto a las simulaciones de alta fidelidad, es que tienen un reducido coste computacional y que además nos permiten estudiar el comportamiento de la película de forma aislada respecto al chorro de gas, lo cual puede ser de gran utilidad en la comprensión de la formación de las inestabilidades.

Además, también se propone llevar a cabo una investigación acerca de la hipótesis históricamente aceptada que asume que la distribución de gradiente de presiones y esfuerzo cortante en la película no se ven afectados por la presencia de la lámina de líquido, lo cual ha sido probado satisfactoriamente por Lacanette et al. [14] para condiciones de escurrido muy diferentes a las de los casos que aquí se contemplan.

2 MODELADO NUMÉRICO

En este capítulo se presentan una serie de explicaciones en cuanto a las estrategias de modelado numérico consideradas en este trabajo. En el apartado 2.1, se establecen las bases de los cálculos de dinámica de fluidos computacional comúnmente conocidos como CFD por sus siglas en inglés (Computational Fluid Dynamics), especialmente orientado al uso del software libre OpenFOAM y las metodologías utilizadas en este trabajo. Seguidamente, se presentan las distintas estrategias de cálculo que se han utilizado para modelar los procesos de escurrido neumático. En orden ascendente en complejidad, en el apartado 2.2 se desarrolla el conocido como modelo 1D basado en las hipótesis de lubricación. Seguidamente, en el apartado 2.3 se explica el funcionamiento de un solver de película líquida que ha sido adaptado para incluir los actuadores del escurrido. En la sección 2.4 se exponen las bases acerca de las simulaciones bifásicas 3D, de un considerablemente mayor coste computacional, pero también de mayor precisión que las anteriores. Por último, en el apartado 2.5 se resumen las correlaciones de los actuadores de escurrido sobre placa plana y se explican las distintas regiones de comportamiento que se pueden encontrar en un chorro impactante.

2.1 Dinámica de fluidos computacional (CFD)

La dinámica de fluidos computacional es un campo que, como ya introduce el propio nombre, utiliza los métodos computacionales para resolver problemas propios de la dinámica de fluidos como lo son el movimiento del fluido, acústica, reacciones químicas... El gran avance de la computación en los últimos años ha permitido que ésta herramienta tenga una importancia relevante a día de hoy en el mundo de la industria y la investigación. Las mayores ventajas son:

- Costes mucho menores a los necesarios para llevar a cabo un estudio experimental de calidad.
- Reducción de los tiempos necesarios para estudiar nuevos diseños.
- Posibilidad de obtener datos que serían imposibles de obtener experimentalmente.

La línea temporal de trabajo para resolver un problema por medio de la dinámica de fluidos computacional es: pre-procesado, resolución, y post-procesado.

- **Pre-procesado:** Consiste en todas las acciones necesarias para convertir nuestro problema en una forma adecuada para que pueda ser resuelto en el siguiente paso. Esto implica definir el dominio de estudio, la geometría, realizar el mallado, la definición de las propiedades, establecer las condiciones de contorno e iniciales adecuadas, modelos de turbulencia...
- **Resolución:** Existen diferentes técnicas de resolución: elementos finitos, métodos espectrales y volúmenes finitos, siendo éste último el utilizado en éste trabajo. Es la técnica más común en este campo, siendo base de los códigos de CFD más conocidos. Se basa en la conservación de las propiedades en cada celda del dominio, lo que lo hace mucho más fácil de comprender que otros.

La dinámica a seguir es: se plantea un problema a resolver, a partir de ahí se obtiene un modelo matemático que exprese el problema en términos matemáticos, en nuestro caso las ecuaciones de Navier-Stokes, sistemas de ecuaciones en derivadas parciales no lineales, el cual no es posible resolver analíticamente salvo en casos sencillos. Por ello, se realiza una discretización para obtener las ecuaciones algebraicas, y finalmente se resuelven de forma iterativa.

Para la solución, cada código ofrece distintos algoritmos entre los que destacan el SIMPLE y el PISO.

- **Post-procesado:** Este paso incluye el procesado de las soluciones proporcionadas por el solver de forma que obtengamos los datos requeridos como la visualización del comportamiento en base a los campos de las variables fluidas, análisis frecuenciales, análisis de las ondulaciones de la película...

2.1.1 Algoritmos de acoplamiento presión/velocidad

En este apartado se desarrolla el funcionamiento de los algoritmos PISO y SIMPLE de acoplamiento de la presión y velocidad necesarias para resolver el sistema de Navier-Stokes para flujos incompresibles, los cuales responden al siguiente par de ecuaciones:

$$\nabla U = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U) + \nabla \cdot (\rho U \times U) = -\nabla p + \rho \Delta U \quad (2)$$

Las razones que hay detrás del uso de estos algoritmos para la correcta solución del sistema son por un lado que el término convectivo de la ecuación de momento es no lineal, y por otro el hecho de que la ecuación de continuidad y momento están intrínsecamente acopladas y el gradiente de presión que aparece en la ecuación de momento es desconocido. Esto último introduce una restricción en el caso de flujos incompresibles: si se introduce un campo de presiones correcto en las ecuaciones de momento, la velocidad resultante debe satisfacer la ecuación de continuidad.

2.1.1.1 Algoritmo SIMPLE

El algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) se utiliza para problemas estacionarios, es decir, cuando la variación temporal se puede considerar despreciable. El algoritmo consiste en los siguientes pasos:

1. Se resuelve la ecuación cantidad de movimiento. Como el valor actual de la presión no se conoce, el valor del gradiente se calcula utilizando los valores de pasos de tiempo anteriores. Con esto, se obtiene un primer campo de velocidades aproximado.
2. Con este campo de velocidades aproximado se estima un campo de presiones corregido para que cumpla la ecuación de continuidad. La presión corregida se calcula por medio de unos factores de relajación para evitar la divergencia de la solución. Se calcula la velocidad relajándola por medio de unos factores igual que antes. Cabe destacar la importancia de la elección de los valores asignados a estos. Un valor muy alto puede producir oscilaciones o incluso divergencia mientras que valores muy bajos pueden hacer que la convergencia sea muy lenta.
3. Se resuelven el resto de variables mediante las ecuaciones de transporte discretizadas.
4. Caso que no se haya alcanzado la convergencia, con estos últimos valores volvemos a ejecutar el algoritmo.

2.1.1.2 Algoritmo PISO

El algoritmo PISO (Pressure-Implicit Split Operator) es una variación del algoritmo SIMPLE desarrollado originalmente para flujos transitorios y más tarde adaptado para problemas estacionarios. Se puede resumir en los siguientes pasos:

1. Se resuelve la ecuación de momento. Como el valor actual de la presión no se conoce, el valor del gradiente se calcula utilizando los valores de pasos de tiempo anteriores. Con esto, se obtiene un primer campo de velocidades aproximado.
2. Con este campo de velocidades aproximado se estima un campo de presiones corregido. Con la presión corregida para que cumpla la continuidad se calcula un nuevo campo de velocidades como ya se ha hecho antes.
3. Para mejorar la solución del SIMPLE se realiza una segunda corrección de presión de la misma forma que antes y con ello se obtiene un nuevo campo de velocidades.
4. Se resuelven el resto de variables mediante las ecuaciones de transporte discretizadas.
5. Caso que no se haya alcanzado la convergencia, con estos últimos valores volvemos a ejecutar el algoritmo.

A diferencia del SIMPLE, aquí la corrección de la presión se realiza dos veces, por lo que requiere mayor almacenamiento y esfuerzo computacional. Como antes, se hace uso de unos factores de relajación que utilizados de la forma correcta aceleran la solución.

2.1.1.3 Algoritmo PIMPLE

Es un algoritmo propio de OpenFOAM para simulaciones transitorias que se puede entender como una combinación del PISO y el SIMPLE. Consiste en implementar una serie de iteraciones internas del algoritmo SIMPLE en el interior de un PISO. Esto mejora la estabilidad de la solución aunque puede llevar asociada una pérdida de información asociada al aumento del paso de tiempo.

2.1.2 Introducción a OpenFOAM

OpenFOAM se trata de un software libre basado en volúmenes finitos y librerías de C++ orientado al uso de métodos numéricos para la resolución y análisis de las ecuaciones fundamentales del movimiento de fluidos. Una de sus principales ventajas es que permite modificar el código, lo que aumenta sus posibilidades en cuanto a que se consigue tener un mayor control sobre su funcionamiento a diferencia de códigos comerciales que son como cajas negras sobre las que nada se puede modificar ni comprobar el funcionamiento interno. Además, se trata de un software en continuo desarrollo sustentado en una comunidad activa que contribuye a la implementación y validación de nuevos solvers. Las capacidades que ofrece son muy elevadas: simulación de flujos compresibles e incompresibles, intercambio de calor, flujos multifásicos o electromagnetismo entre otros.

Por todo esto, el uso de OpenFOAM se está viendo aumentado enormemente tanto en el campo de la investigación en universidades y centros especializados como en la industria en donde juega un papel fundamental en los diseños de grandes empresas como Audi, Hitachi, Volkswagen, Airbus o Boeing entre otras.

A continuación se trata de explicar el flujo de trabajo y la división de la información en cuanto a la preparación de un caso en OpenFOAM, ya que no cuenta con una interfaz gráfica para la configuración de los casos. La estructura de ficheros mínima para un cálculo se muestra en la Figura 3. La información está estructurada básicamente en tres directorios: *0*, *constant* y *system*. El directorio *0* representa el primer paso de tiempo, por lo que es necesario

establecer ahí las condiciones iniciales y de contorno. En *constant* se almacena por un lado la información de las constantes del cálculo como son las propiedades de los fluidos y la gravedad entre otros; y por otro la información de la malla en el subdirectorio *polyMesh*. Por último, en el directorio *system* se establece la configuración del solver. Aquí se deben de incluir al menos 3 ficheros. El fichero *controlDict* establece los controles acerca del solver a utilizar, así como el tiempo máximo de simulación y el control del paso de tiempo. En *fvSchemes* se definen los esquemas numéricos de discretización, y en *fvSolution* la configuración de los algoritmos de solución de las ecuaciones y las tolerancias para los mismos.

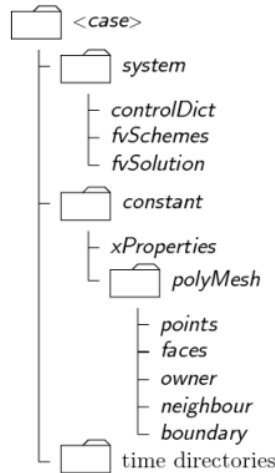


Figura 3: Estructura de ficheros genérica de un caso en OpenFOAM. [15]

2.2 Modelo 1D

Este modelo se trata de una simplificación básica del proceso real. Está basado en las ecuaciones de Navier-Stokes sobre las cuales se realizan una serie de supuestos que se describirán a continuación y que las simplifican en gran medida. Tanto es así que este modelo permite obtener las características más importantes del recubrimiento, como son el espesor medio de la película final y el espesor del run-back, a cambio de un reducido coste computacional. La validación experimental y numérica de estos parámetros ha sido realizada por Gosset [6] y Lacanette et al. [14]. En resumen, esta es una herramienta de gran utilidad en líneas de galvanización, ya que permite hacer estimaciones razonables en unos minutos con ayuda de un código simple desarrollado en Matlab o similar.

La primera simplificación que se debe tener en cuenta es que el proceso es principalmente 2D, tal y como se refleja en la figura 2 y de la cual se hereda la notación para las explicaciones posteriores. Como ya se ha dicho, la base del modelo son las ecuaciones de Navier-Stokes en 2D:

$$\partial_x u + \partial_y v = 0 \quad (3)$$

$$\rho_l (\partial_t u + u \partial_x u + v \partial_y u) = -\partial_x P_l + \mu_l (\partial_{xx} u + \partial_{yy} u) - \rho_l g \quad (4)$$

$$\rho_l (\partial_t v + u \partial_x v + v \partial_y v) = -\partial_y P_l + \mu_l (\partial_{xx} v + \partial_{yy} v) \quad (5)$$

Siendo $\mathbf{v} = (u, v)$ la velocidad en el líquido, ρ_l la densidad en el líquido, μ_l la viscosidad dinámica en el líquido, g la aceleración de la gravedad, P_g la presión en la parte del gas, y P_l lo mismo para la parte del líquido.

En primer lugar, se supone que el flujo es estacionario, por lo que todas las variaciones temporales quedan anuladas ($\partial_t \rightarrow 0$). A partir de este punto, se hacen las dos simplificaciones clave del modelo. Por un lado, se supone que no hay una interacción entre el gas y el líquido, si no que el gas se comporta como si no hubiese líquido, por lo que el comportamiento de la película se verá sometido al gradiente de presiones ∇p y esfuerzo cortante τ que se le aplique. Estos dos factores son los conocidos como actuadores del escurrido, para los cuales históricamente se ha propuesto una extensa cantidad de expresiones matemáticas acerca de sus distribuciones sobre placa plana, y de las cuales se recoge un resumen en el apartado 2.5. Por otro lado, se utiliza la aproximación de lubricación, en la que se asume que la interfaz del líquido se deforma suavemente en la dirección del flujo ($\partial_x h \rightarrow 0$) y por tanto se supone que las velocidades en la dirección perpendicular a la capa de líquido son despreciables ($v \rightarrow 0$), lo que significa que el flujo es monodimensional siguiendo el eje x , y que está completamente desarrollado ($\partial_x \rightarrow 0$). Teniendo todo esto en cuenta, las ecuaciones de N-S se simplifican a lo siguiente:

$$\mu_l \partial_{yy} u = \partial_x P + \rho_l g \quad (6)$$

$$\partial_y P = 0 \quad (7)$$

Que por medio de una integración doble, y haciendo uso de las correspondientes condiciones de contorno ($\mu_l \partial_y u|_{y=0} = \tau_{wj}(x)$) y ($u|_{y=0} = U_s$) permite obtener el perfil de velocidades a través del espesor para cada posición en función de la distancia al punto de impacto:

$$u(x, y) = \frac{1}{2} A y^2 + \left(\frac{\tau_g(x)}{\mu} - A(x) h(x) \right) y + U_s \quad (8)$$

siendo $A = \left(\frac{\partial_x P(x) + \rho g}{\mu} \right)$. Es importante destacar que la expresión del perfil de velocidades depende de los actuadores de escurrido: el gradiente de presiones $\partial_x P(x)$ y esfuerzo cortante $\tau_g(x)$. Por otro lado, no hemos entrado a distinguir si el término presión es evaluado para la fase gas o líquida, pero se asume que para las películas lo suficientemente finas, la presión en el líquido P_l es igual a la efectuada por el chorro de aire P_g y corregida por el término de tensión superficial σ debido a la deformación del menisco en la zona del runback:

$$P_l = P_g - \sigma \left(\frac{\partial_{xx} h}{(1 + \partial_x^2 h)^{3/2}} \right) \quad (9)$$

En los modelos de lubricación este último término se desprecia debido a que se supone que la deformación de la superficie libre es suave. Este término puede hacerse importante para casos en los que el número de capilaridad, $Ca = \mu U_s / \sigma$, se haga especialmente bajo, aunque ya ha sido probado que es despreciable para el cálculo del espesor medio final [16], [17]. Volviendo al desarrollo del modelo, una vez obtenido el perfil de velocidades en la película, se puede obtener el caudal volumétrico integrando a través del espesor:

$$q = \int_0^h u(y) dy = -\frac{1}{3} \left(\frac{\partial_x P + \rho g}{\mu} \right) h^3 + \frac{1}{2\mu} \tau_g h^2 + U_s h \quad (10)$$

Se puede poner en forma adimensional haciendo que cada variable sea el producto de la variable adimensionalizada multiplicada por un valor de referencia. Estos valores de referencia son los obtenidos por el simple arrastre de la película por el substrato sin tener en cuenta la acción del chorro de aire. Haciendo esto directamente y dividiendo la expresión 10 por $[u][h]$ se obtiene:

$$\hat{q} \left\{ \frac{[q]}{[u][h]} \right\} = - \left(\left\{ \frac{[p][h]^2}{\mu[x][u]} \right\} \partial_{\hat{x}} \hat{P} + \left\{ \frac{g[h]^2}{\nu[u]} \right\} \right) \frac{\hat{h}^3}{3} + \left\{ \frac{[\tau][h]}{\mu[u]} \right\} \frac{1}{2} \hat{t}_g \hat{h}^2 + \hat{h} \quad (11)$$

Siendo los valores de referencia los siguientes:

$$[h] = \sqrt{\frac{\mu U_s}{\rho g}} ; [\tau] = \frac{\mu U_s}{[h]} = \sqrt{\rho g \mu U_s} ; [p] = \rho g [h] ; [q] = \frac{2}{3} U_s [h] ; [u] = U_s ; [x] = [h]$$

De este modo, sustituyendo los valores de referencia en la ecuación 10, y reordenando la ecuación llegamos a la siguiente expresión:

$$(\partial_{\hat{x}} \hat{P} + 1) \hat{h}^3 - \frac{3}{2} \hat{t}_g \hat{h}^2 - 3 \hat{h} + 2 \hat{q} = 0 \quad (12)$$

En esta expresión tenemos dos incógnitas que son \hat{h} y \hat{q} , ya que $\partial_{\hat{x}} \hat{P}$ y \hat{t}_g ya hemos dicho que van a ser las entradas al modelo. Esta ecuación va a tener 3 soluciones para todos los valores de x , aunque solo dos de ellas son positivas. Cabe recordar que una de las incógnitas es el \hat{q} , el cual es único y constante para todos los valores de x , de forma que la distribución de esfuerzo cortante y gradiente de presiones es la que define el espesor en cada punto. La solución del problema pasa por ir iterando hasta dar con un caudal que nos lleva a obtener una distribución de espesores continua y por tanto con sentido físico. Estas dos soluciones son dos raíces reales positivas que corresponden a los puntos alejados de la zona de impacto. Es decir, reflejan por un lado el espesor final para el flujo aguas abajo y por otro el espesor de runback.

Partiendo de este modelo, se puede hacer una última simplificación que da lugar a lo que se conoce como modelo 0-D o "knife model". Esta simplificación consiste en analizar el punto de gradiente de presiones y esfuerzo cortante máximo, que corresponde con el punto en el que la velocidad de la superficie de la película es nula y que divide las dos regiones: la parte de la película final y la parte del runback. Para este punto, el \hat{q} es óptimo, por lo que $\partial_{\hat{h}} \hat{q} = 0$. Esto hace que si tomamos la derivada parcial respecto al espesor a toda la ecuación 12 nos queda lo siguiente:

$$(\partial_{\hat{x}} \hat{P} + 1) \hat{h}^2 - \hat{t}_g \hat{h} - 1 = 0 \quad (13)$$

Esta es una ecuación de segundo grado en \hat{h} que se puede resolver directamente para sacar el espesor óptimo \hat{h}_o :

$$\hat{h}_o = \frac{\hat{t}_{g_{max}} + \sqrt{\hat{t}_{g_{max}}^2 + 4(\partial_{\hat{x}} \hat{P}_{max} + 1)}}{2(\partial_{\hat{x}} \hat{P}_{max} + 1)} \quad (14)$$

Con este valor, se puede volver a la expresión del modelo 1-D y obtener el caudal \hat{q} . Además, como el caudal ha de ser igual para toda la película, se puede utilizar este valor en un punto lejano al punto de impacto en la región de la película final para obtener el espesor final, ya que ahí se puede asumir que la velocidad de la película es constante, igual que ocurre con el valor de \hat{h}_f , por lo que este se puede calcular de la siguiente forma:

$$\hat{h}_f = \frac{\hat{q}}{U_s} \quad (15)$$

2.3 Modelo integral de película líquida de OpenFOAM

Este modelo es parte de un solver conocido como *reactingParcelFilmFoam*, *reactingParcelFoam* a partir de la versión 6 de OpenFOAM. Se trata de un solver transitorio muy particular orientado al cálculo de flujos multifásicos que incluyen sprays y películas líquidas [18]. Además de los modelos de película, implementa una gran cantidad de estrategias en cuanto a la modelización de reacciones químicas y combustión sobre los que no se entrará a discutir al no ser necesarios para la simulación de los casos de escurrido neumático. Una de las características de este solver es que utiliza un seguimiento basado en un sistema de referencia lagrangiano para las partículas de la fase en dispersión, mientras que la fase continua se resuelve en el sistema euleriano. Por poner un ejemplo en el que se vean los distintos aspectos que incluye, en la simulación de una aplicación de un spray de pintura sobre una superficie, se utiliza el sistema de referencia lagrangiano para las partículas de pintura, mientras que el gas se resuelve con el sistema euleriano. La película de pintura, que es lo que a nosotros nos interesa, se resuelve con uno de los modelos de película líquida.

Una vez explicada la filosofía detrás de este solver nos centramos en el modelo integral de película líquida implementado y desarrollado por Meredith et. al. [19], basado en las ecuaciones de películas finas y que recibe el nombre de *kinematicSingleLayer*. En este modelo se asume que el flujo en la dirección normal a la superficie es despreciable y por tanto permite integrar las variables a través del espesor. Por tanto, las dos incógnitas son por un lado el espesor local de la película h y la velocidad media \mathbf{u} . En este caso, las ecuaciones de N-S quedan de la siguiente forma:

$$\partial_t(\rho h) + \nabla_s \cdot (\rho h \mathbf{u}) = 0 \quad (16)$$

$$\partial_t(\rho h \mathbf{u}) + \nabla_s \cdot (\rho h \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -h \nabla_s P + \tau_g - \tau_w + \tau_\theta + \rho g_t h \quad (17)$$

En donde la presión se calcula como $P = P_g - \rho g_n h - \sigma \kappa h$, siendo P_g la presión en la gas, g_n y g_t las componentes de la gravedad en dirección normal y tangencial a la superficie, σ la tensión superficial y κ la curvatura que se aproxima por medio de la derivada espacial segunda del espesor local h . En cuanto a los términos τ se refieren por orden a los esfuerzos cortantes producidos por el gas, el esfuerzo cortante en la pared y el debido a los efectos producidos por la fuerza de ángulo de contacto.

El dominio de cálculo está formado por dos regiones: una región primaria 3D de la que ya hemos hablado que simula el comportamiento de la fase gas, y la región correspondiente a la película líquida, que se obtiene por medio de una extrusión de 1 celda de espesor de la anterior. Las ecuaciones presentadas se resuelven por tanto para esta malla de superficie 2D sobre las que se obtiene el espesor local y la velocidad promedio a través del mismo, tal y como se esquematiza en la Figura 4. La región primaria puede ser calculada o como en nuestro caso modelada en base a los actuadores de escurrido sacados de las correlaciones sobre placa plana recogidas en el apartado 2.5 o de los propios resultados de las simulaciones 3D multifásicas.

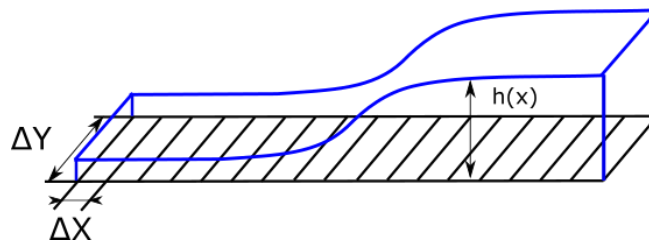


Figura 4: Esquema de la filosofía de cálculo del modelo integral de película líquida para un proceso de escurrido neumático en 1D.

Cabe destacar que el hecho de no tener la necesidad de mallar en la dirección vertical al sustrato supone una gran ventaja respecto a la metodología VOF, ya que limita el número de celdas y por tanto reduce en gran medida el coste computacional. También, a diferencia del modelo 1D sí se tiene en cuenta la inercia, lo que implica que podremos obtener soluciones no estacionarias, lo cual haría posible reproducir el patrón de ondulaciones de la película.

Por último, es importante volver a incidir sobre la manera en la que se introducen los parámetros de entrada al modelo debido a que estamos ante aproximaciones “one-way”, en las que se asume que el papel que juega la presión y esfuerzo cortantes producidos por el chorro de gas no se ven afectados por la presencia de la película. Esto ocurre de igual forma para el modelo 1D y para este modelo integral, tanto si resolvemos la fase gas como si no lo hacemos, ya que la deformación de la película no se tiene en cuenta en el cálculo de la región primaria. Las diferencias entre los resultados obtenidos con y sin película fue probado por Lacanette et al. [14] mediante experimentos y simulaciones 2D de alta fidelidad, si bien las condiciones de escurrido eran muy diferentes a las que aquí se refieren. Para comprobar su validez, en el apartado 5.3.1 se recogen una serie de simulaciones con y sin líquido que nos servirán también para utilizar como entradas a estos modelos. Es obvio que esta aproximación nos aleja del comportamiento real de la interacción entre el gas y el líquido, si bien es cierto que nos puede ayudar a entender cómo son afectados el uno al otro y así entender los fenómenos que dan origen a la formación de ondulaciones.

Hemos dicho que una de las ventajas que ofrece OpenFOAM respecto a sus homólogos comerciales es la versatilidad en cuanto a la implementación de pequeños cambios en el código para tener en cuenta diferentes enfoques. Esta filosofía “*copy, paste and adapt*” sobre la que se construye OpenFOAM permite hacer cambios en la forma original del código fuente sin tener que desarrollar un solver desde cero. En este caso, se ha buscado la forma de adaptar el código *reactingParcelFilmFoam* para poder introducir los parámetros de escurrido sin tener que resolver explícitamente la fase gas, tal y como se realiza en el modelo 1D. En particular, es necesario modificar el modelo de película líquida *kinematicSingleLayer* que ya ha sido explicado en el apartado anterior. A continuación, se detallan los pasos necesarios para introducir el campo de presiones del gas.

Originalmente, en el código se realiza un mapeo de la solución de la fase gas sobre la malla de superficie en la que se calcula la película líquida. Aprovechando esta parte del código y teniendo en cuenta que los cálculos de la región del gas no nos interesan, se ha utilizado la variable de la presión mapeada $p_{Primary}$, que entra en las ecuaciones del modelo como la P_g (presión de la fase gas).

```
void kinematicSingleLayer::transferPrimaryRegionThermoFields()
{
    DebugInFunction << endl;

    // Update fields from primary region via direct mapped
    // (coupled) boundary conditions
    UPrimary_.correctBoundaryConditions();
    // pPrimary_.correctBoundaryConditions(); //Comment this line to avoid mapping
    rhoPrimary_.correctBoundaryConditions();
    muPrimary_.correctBoundaryConditions();
}
```

Por otro lado, mientras que en el código original esta es una variable que se escribe en cada paso de tiempo, ahora la filosofía es la contraria y será necesario definir las condiciones de contorno e iniciales del campo de presiones. Esto se consigue haciendo las siguientes modificaciones en la parte final en la que se definen las variables del modelo:

```
pPrimary_  
(  
    IObject  
    (  
        "pPrimary",  
        time().timeName(),  
        regionMesh(),  
        IObject::MUST_READ,  
        IObject::AUTO_WRITE  
    ),  
    regionMesh(),  
)
```

Nótese que estamos introduciendo la presión y no el gradiente, que es el que realmente realiza el trabajo de escurrido, pero obviamente el resultado es el mismo.

A continuación se resumen los pasos a seguir para compilar las modificaciones anteriormente comentadas, si bien pueden ser extendidas a cualquier código. En primer lugar, para no corromper los ficheros de la instalación, se copia el código de que se va a modificar en un directorio local.

```
>> cp -r $FOAM_SRC/regionModels/surfaceFilmModels $HOME
```

Una vez lo tenemos copiado, se modifica el nombre de este directorio con un nombre característico que permita identificarlo claramente junto con la versión. Es importante ir guardando versiones con los cambios, ya que debido a la complejidad del código y la recursividad de librerías de las que hace uso cada solver a veces se hace muy complicado encontrar el origen de los errores de compilación.

```
>> cd $HOME  
>> mv surfaceFilmModels RPPF_tau_pPrim_v0  
>> cd RPPF_tau_pPrim_v0  
>> cd surfaceFilmModels
```

En este directorio se encuentran otros subdirectorios que contienen el código de distintas funciones relacionadas con el modelo de película líquida. El directorio que nos interesa modificar en este caso es el de *kinematicSingleLayer*, que incluye las ecuaciones del modelo integral explicado anteriormente. Lo primero, es necesario cambiar el nombre para diferenciarlo de la variante original.

```
>> mv kinematicSingleLayer myKinematicSingleLayer
```

Ahora se modifica este nombre recursivamente en todos los ficheros de los directorios por debajo del actual para que a la hora de compilar busque en los directorios modificados, así como hacer que OpenFOAM entienda que estamos llamando al nuevo código cuando en los archivos de configuración del caso pongamos el nombre de la nueva versión. Esto se hace con el siguiente comando:

```
>> grep -rli 'kinematicSingleLayer' * | xargs -i@ sed -i 's/ kinematicSingleLayer/  
myKinematicSingleLayer/g' @
```

Además, dentro del directorio *myKinematicSingleLayer*, hay una serie de ficheros que contienen diferentes partes del código del modelo que han de ser renombrados con la nueva nomenclatura de igual forma hemos hecho hasta ahora.

```
>> mv kinematicSingleLayer.C myKinematicSingleLayer.C  
>> mv kinematicSingleLayer.H myKinematicSingleLayer.H  
>> mv kinematicSingleLayerI.H myKinematicSingleLayerI.H  
>> mv kinematicSingleLayerTemplates.C myKinematicSingleLayerTemplates.C
```

Una vez hecho esto, hay que modificar los ficheros de la compilación para que se compile en nuestra cuenta personal y no sobre los archivos originales. Es probable que de no realizar este paso, al tratar de compilar se nos emita un mensaje de error relacionado con los permisos de escritura de los directorios en los que está instalado OpenFOAM.

```
>> cd ..  
>> vi Make/files
```

Este fichero es el que utiliza el software de compilación para saber qué ficheros tiene que compilar. La larga lista de códigos a compilar da una idea de la complejidad de este modelo, en la que el mínimo cambio que se quiera hacer en uno de ellos se extiende al resto, lo que hace particularmente engorroso realizar cambios importantes en el mismo. De ahí que se haya tratado de buscar una solución en la que se aprovechan las variables ya implementadas en el código original. Volviendo a las modificaciones, hay que ir hasta la última línea y cambiar el *FOAM_LIBBIN* por *FOAM_USER_LIBBIN*. En este punto, es recomendable primero compilar sin hacer ninguna modificación en el código para ver si todo va bien.

```
>> cd ..  
>> wmake surfaceFilmModels
```

Este comando llevará unos minutos y una vez finalizado este tiempo si no se ha recibido ningún mensaje de error quiere decir que se ha compilado con éxito. En este momento, se podrían realizar los cambios para introducir los parámetros de escurrido tal y como se ha explicado al inicio de este apartado.

Para hacer uso del modelo es importante recordar que ahora en los ficheros de configuración del caso hay que actualizar el nombre del modelo, ya que en caso contrario OpenFOAM nos avisará de que el modelo de película que queremos utilizar no está disponible, y en la lista de opciones aparecerá el que hemos compilado.

2.4 Modelo 3D VOF LES

En esta sección se presentan las simulaciones numéricas 3D de alta fidelidad. Estos cálculos, a diferencia de los casos anteriores, simulan la interacción entre la fase gas y la fase líquida por medio de un modelado VOF (Volume of Fluid) junto a la metodología LES (Large Eddy Simulation) para el cálculo turbulento del chorro de gas. A continuación, en los apartados 2.4.1 y 2.4.2 se explica en detalle el funcionamiento de los mismos.

2.4.1 Modelado multifásico. Volume of Fluid (VOF)

Los flujos multifásicos están presentes en multitud de procesos industriales. El estudio numérico de estas situaciones es complejo dada la discontinuidad producida por la transición entre ambas fases causada por el cambio brusco en las propiedades. Además, también la tensión superficial juega un papel importante debido a la superficie libre que separa ambas fases.

La metodología VOF fue presentada por Hirt y Nichols [20] y se basa en la definición de un parámetro α que representa la fracción de cada fase en la celda. Si en la celda solo hay líquido, entonces $\alpha = 1$. Por lo contrario, si en la celda solo hay gas $\alpha = 0$. La superficie libre por tanto se considera que está en las celdas en las que $\alpha = 0,5$. Respecto a ecuaciones de Navier-Stokes, se introduce este parámetro de tal forma que se le aplica un promedio ponderado a las propiedades en función del mismo, lo que permite que se puedan resolver como si se tratase de una única fase.

La reconstrucción de la superficie libre se lleva a cabo por medio de un algoritmo que permite representarla con una línea en 2D o un plano en 3D en base al valor de α y de la

contribución de las celdas vecinas, tal y como puede verse en el esquema de la Figura 5. Es importante entender que con este tipo de modelos necesitamos un tamaño de celda suficientemente pequeño para poder recuperar una interfaz continua y de calidad, tanto más cuanto mayor sea su curvatura, lo que hace necesario tener un refinamiento adecuado en estas zonas.

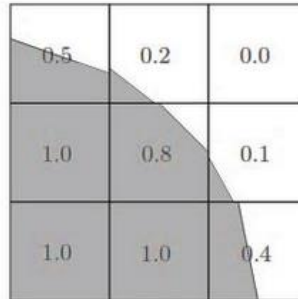


Figura 5: Esquema de funcionamiento del algoritmo de reconstrucción de la superficie libre. [21]

2.4.2 Modelado de la turbulencia

La turbulencia es un factor clave en el comportamiento del flujo de gas, y por ello en la interacción de gas y líquido que parece ser la culpable del fenómeno de generación de ondulaciones en las líneas de galvanizado. En CFDs existen múltiples modelos para resolver la turbulencia de forma numérica. No existe un modelo de turbulencia universal, por lo que se debe conocer las capacidades y limitaciones de los modelos para poder decidir cuál se ha de aplicar. A continuación se expone de forma general en qué consisten cada una de las estrategias de cálculo/modelado de la turbulencia de mayor a menor precisión. A modo de resumen, en la Figura 6 se muestra esquemáticamente la capacidad de los diferentes modelos para el cálculo de la turbulencia en cálculos CFD.

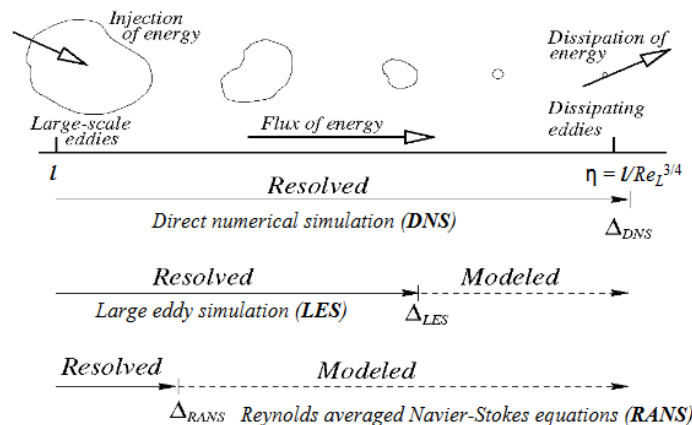


Figura 6: Esquema sobre los diferentes modelos de turbulencia en cálculos CFD. [22]

2.4.2.1 DNS (Direct Numerical Simulation)

Es lo ideal a la hora de predecir el movimiento fluido ya que se trata de resolver directamente las ecuaciones de Navier-Stokes sin usar ningún tipo de modelo de turbulencia. A esto se le conoce como DNS. Sin embargo, esta solución requiere de un gran esfuerzo computacional en términos de tiempo y almacenamiento de datos, ya que las celdas de resolución numérica deben ser muy pequeñas para resolver todas las escalas del movimiento

turbulento, que pueden llegar a ser del orden de la escala de Kolmogorov. Por lo tanto, este tipo de solución resulta inviable para casos como el que se estudian en este trabajo fin de máster.

2.4.2.2 LES (Large Eddy Simulation)

Una alternativa a DNS es resolver únicamente las estructuras turbulentas más energéticas de escalas grandes y modelar las escalas pequeña. De esta forma, resolvemos con exactitud el movimiento turbulento en aquellas escalas más relevantes del proceso que dominan el comportamiento del chorro de gas. Las escalas más pequeñas tienen un comportamiento más o menos universal, por lo que su modelado resulta sencillo y preciso.

En vez de promediar en tiempo las variables, LES lleva a cabo un filtrado espacial para separar los torbellinos grandes de los pequeños. Para ello, primero se establece un cierto umbral con el propósito de resolver de forma transitoria únicamente los torbellinos de escalas mayores al límite impuesto, el cual corresponde al tamaño de celda. Como resultado del filtrado, hemos eliminado artificialmente los torbellinos de escalas más pequeñas. Estos torbellinos de pequeña escala generan esfuerzos debido a ellos mismos y las interacciones con los de escalas mayores, que no se tienen en cuenta. Por ello, es necesario modelarlos mediante lo que se conoce comúnmente por sus términos en inglés: *sub-grid-scale (SGS) models*. Uno de los más conocidos es el Smagorinsky-Lilly SGS model, en el que el esfuerzo SGS τ_{ij} se considera proporcional a la velocidad de deformación del flujo resuelto $S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$.

$$\tau_{ij} = -2\mu_{SGS}\bar{S}_{ij} + \frac{1}{3}\tau_{ii}\delta_{ij} \quad (18)$$

El esfuerzo está completamente modelado por la expresión 18, en la que el último término asegura que la suma de los esfuerzos del modelo es igual a la energía cinética de los torbellinos por debajo del umbral de filtrado. La constante de proporcional μ_{SGS} es la viscosidad SGS dinámica, tiene dimensiones de Pa·s y se obtiene de la siguiente forma.

$$\mu_{SGS} = \rho(C_s\Delta)^2|\bar{S}| \quad (19)$$

$$|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}} \quad (20)$$

Donde C_s es una constante del modelo dependiente del caso a simular que suele oscilar entre 0.1 y 0.2, $\Delta = \sqrt[3]{\Delta_x\Delta_y\Delta_z}$ es el umbral de filtrado y $|\bar{S}|$ la velocidad de deformación media de la parte resuelta del flujo.

LES representa de forma muy precisa la turbulencia, pero para aplicaciones industriales sigue resultando un gran reto en términos de tiempo computacional y volumen de datos ya que requiere de celdas y pasos de tiempo lo suficientemente pequeños para capturar dichas estructuras turbulentas.

2.4.2.3 RANS (Reynolds Average Navier Stoke)

Como ya se comentó, DNS y LES requieren de una gran potencia computacional y resulta inviable su uso para la mayoría de aplicaciones industriales. La alternativa es modelar todas las escalas turbulentas, resolviendo ecuaciones adicionales de transporte que resuelven variables que representan el comportamiento turbulento. Estos modelos se basan en la estadística y parámetros empíricos. Se les conoce como RANS; su uso está muy extendido

en la solución de problemas industriales, dado su relativo bajo coste computacional y robustez. Por otro lado, en muchos problemas industriales, sólo es necesario entender las estructuras generales del movimiento sin entrar en detalles en el comportamiento local de los torbellinos o escalas turbulentas, por lo que esta aproximación es suficiente.

De forma general, los modelos RANS resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes de la velocidad promediada, combinándolas junto con ecuaciones que modelan las variables turbulentas. Podemos encontrar gran cantidad de modelos de turbulencia, pero los más comunes y de uso más extendido son los modelos denominados $k-\epsilon$, que incluyen dos ecuaciones para el modelado de la turbulencia y que resuelven dos variables, k (Energía cinética turbulenta) y ϵ (Disipación de energía turbulenta). Son métodos robustos muy utilizados a pesar de las limitaciones que tienen, ya que se comporta deficientemente en geometrías complejas con altos gradientes de presiones, no funciona con precisión cerca de las paredes, etc. Una variante de los modelos $k-\epsilon$ son los modelos $k-\omega$, que presentan un tratamiento adecuado de la solución de la turbulencia de la pared cuando existen grandes gradientes de presión y números de Reynolds bajos. El $k-\omega$ SST es una mezcla que alterna entre un $k-\omega$ en las zonas cercanas a la pared y un $k-\epsilon$ en las zonas alejadas, beneficiándose de las ventajas de ambos.

2.5 Correlaciones para los actuadores de escurrido

Como ya se ha dicho en apartados anteriores, tanto para el modelo 1D como para el modelo integral de película líquida, es necesario introducir como entrada los actuadores de escurrido: la distribución espacial de esfuerzo cortante y de gradiente de presión. En estudios anteriores, como Lacanette et al. [14] se suele hacer uso de correlaciones obtenidas en base a estudios experimentales sobre placa plana, aunque en este trabajo también se plantea el uso de las distribuciones obtenidas en base a los resultados de las simulaciones 3D VOF LES, ya que a priori son más precisas al tener en cuenta la presencia de la lámina líquida. Los resultados numéricos contienen ruido, por eso para evitarlo se hace uso de las correlaciones ajustadas para que se adapten a los resultados numéricos. De esta forma, por un lado se consigue eliminar el ruido de las entradas al modelo, y por otro hace más fácil introducir los actuadores de escurrido, ya que en vez de tener que mapear los resultados de las simulaciones 3D VOF LES sobre cada malla de cálculo, solo hay que introducir la expresión ajustada de cada variable.

Numerosos trabajos de investigación tanto numéricos como experimentales se han centrado en obtener las distribuciones espaciales de los actuadores de escurrido para placa plana. Es importante destacar que no existe una correlación universal, si no que cada expresión se ciñe a unos rangos para los cuales ha sido ajustada.

Antes de presentar las correlaciones y en relación a los parámetros mencionados, es interesante poner el foco de atención en las diferentes zonas en cuanto al comportamiento del chorro de gas recogidas en [1]. Justo a la salida del inyector se sitúa una zona de que se conoce como flujo libre y que se extiende aproximadamente una distancia $0.75Z$. Incluye el núcleo potencial, la capas de mezcla, y dependiendo del \hat{Z} una región de transición y finalmente la de flujo desarrollado. Inmediatamente después, se encuentra la zona de impacto hasta el obstáculo que se extiende $0.25Z$. Aquí, el flujo se divide en dos flujos paralelos a la dirección del substrato. Esta última zona se denomina como región de chorro de pared en la que el flujo se vuelve a acelerar en la parte más cercana al obstáculo y que resulta crucial para la estabilidad de la película.

En la Figura 7 se representan de forma más detallada las zonas que componen la región de flujo libre. El núcleo potencial se caracteriza por ser una zona en la que la velocidad es uniforme e igual a la velocidad axial en el eje del chorro con componente transversal nula. Este comportamiento se extiende entre la salida del inyector y entre 3 y $6d$, según la intensidad turbulenta del chorro y la distancia al obstáculo. A continuación se desarrollan las capas de

mezcla debidas a la interacción entre el chorro y el aire del ambiente. En los límites entre ambos se produce un esfuerzo cortante que es el desencadenante de la formación de inestabilidades. En el desarrollo del chorro, estas capas de mezcla progresan hacia el interior llegando a converger y dando paso a la región de transición, marcada por el movimiento inestable del chorro que produce las fluctuaciones laterales del chorro, muy determinantes en la producción de ondulaciones de la película final. Por último, la zona de flujo desarrollado es muy difícil de ver en líneas de galvanización debido a que se da para $\hat{Z} \geq 20$ donde $\hat{Z} = Z/d$, lo cual no es muy común en estos casos.

La zona de impacto es la región más determinante en el estudio de este proceso, ya que es donde se encuentra el esfuerzo cortante y el gradiente de presiones que produce el trabajo de escurrido de la película. El punto de remanso es donde se produce la separación del chorro y, por tanto, desencadenante de gradientes elevados que son el origen de la anisotropía en el flujo.

En el desarrollo de las correlaciones, los parámetros más importantes son la presión dinámica del flujo de gas a la salida del inyector y el ratio \hat{Z} . Para el caso de \hat{Z} reducidos, el chorro permanece en el núcleo potencial en el que el trabajo del mismo está muy concentrado y genera gradientes de presión abruptos. Para el caso contrario en el que \hat{Z} sea alto, el gradiente de presión máximo cae rápidamente ya que los efectos viscosos en el borde del chorro extraen energía del flujo principal a la vez que amplían la zona de influencia.

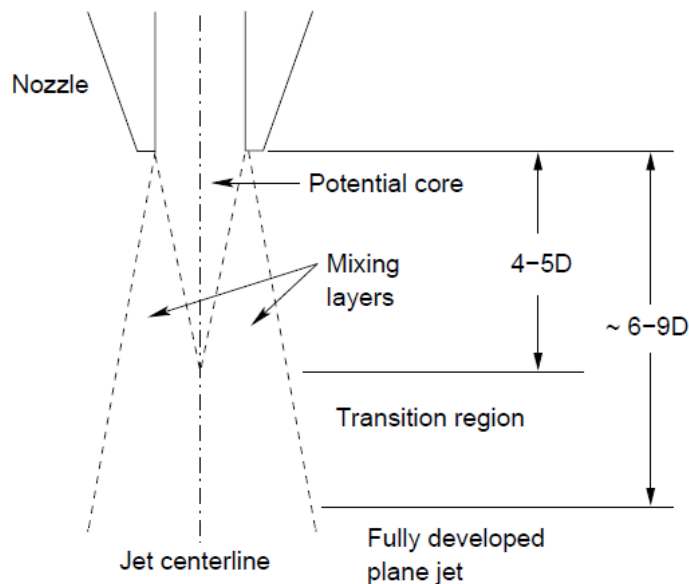


Figura 7: Esquema del desarrollo del chorro a la salida del inyector. [1]

En el presente trabajo únicamente se recogen dos de las correlaciones que han tenido una buena aceptación en la bibliografía y que encajan en cuanto a rango de aplicabilidad con nuestros casos de estudio. Beltaos y Rajaratman [23] proponen una serie de relaciones para placa plana con chorros desarrollados ($\hat{Z} > 8$).

$$\frac{P}{P_{max}} = e^{-0.693\xi^2} \quad (21)$$

En donde la P_{max} es la presión máxima a la pared que obviamente coincide con el punto de remanso, y $\xi = x/b$ siendo b la distancia entre el eje del chorro y el punto en el que $P(x) = P_{max}/2$. Este punto varía linealmente con la distancia de escurrido ($b = 0.125Z$). Por otro lado, la presión máxima disminuye linealmente con \hat{Z} , tal y como era esperado.

$$\frac{P_{max}}{\Delta P_N} = C_p / \hat{Z} \quad (22)$$

Siendo C_p una constante de valor 7 y ΔP_N la presión del gas a la salida del inyector. Pues bien, estas relaciones de presión conducen a que:

$$\nabla P_{max} = 0.714 \frac{P_{max}}{b} \quad (23)$$

$$\nabla P(\xi) = -1.386 \xi \frac{\nabla P_{max}}{b} e^{-0.693 \xi^2} \quad (24)$$

En cuanto al esfuerzo cortante, se propone la siguiente correlación:

$$\tau(\xi) = 0.26 \frac{d\Delta P_N}{Re_j^{0.2}} \left(\frac{1}{|\xi| + 4} \right) \left(\frac{1}{b} \right) \quad (25)$$

$$Re_j = \frac{U_j d}{\nu} = \sqrt{(2\Delta P_N d^2) / \rho \nu^2} \quad (26)$$

Por otro lado, Tu y Wood [24] proponen una modificación para la presión basada en las explicadas anteriormente. En este caso, la correlación para la distribución de presiones

$$P(\xi) = P_{max} e^{-0.693 \xi^2} + \frac{0.01895 |\xi|}{1 + (\xi - 1.67489)^2} \quad (27)$$

En donde la P_{max} se calcula de distinta forma según la distancia de escurrido. Cuando el impacto se produce en el núcleo potencial, la presión máxima se mantiene constante e igual a la presión en el inyector ΔP_N . Por otro lado, se sale de esta zona y se aumenta la distancia de escurrido, la presión máxima disminuye de forma proporcional a la distancia. Gosset [1] propone una corrección menor en cuanto a la pérdida de presión en el núcleo potencial.

$$\left[\begin{array}{ll} P_{max} = 0.98 \Delta P_N & \forall \hat{Z} < 5 \\ P_{max} = 6.5 (d \Delta P_N) / Z & \forall \hat{Z} > 5 \end{array} \right. \quad (28)$$

$$\left[\begin{array}{ll} P_{max} = 0.98 \Delta P_N & \forall \hat{Z} < 5 \\ P_{max} = 6.5 (d \Delta P_N) / Z & \forall \hat{Z} > 5 \end{array} \right. \quad (29)$$

$$\left[\begin{array}{ll} b = 0.98d & \forall \hat{Z} < 5 \\ b = 0.125Z & \forall \hat{Z} > 5 \end{array} \right. \quad (30)$$

$$\left[\begin{array}{ll} b = 0.98d & \forall \hat{Z} < 5 \\ b = 0.125Z & \forall \hat{Z} > 5 \end{array} \right. \quad (31)$$

3 SIMULACIONES NUMÉRICAS

A continuación se explican los detalles de la configuración de los cálculos numéricos realizados en este proyecto. En el apartado 3.1 se encuentran resumidos los aspectos principales en cuanto a las simulaciones 3D VOF LES, en las que se han utilizado dos variantes del mismo inyector, lo que permite analizar la influencia de los cambios en la geometría sobre el comportamiento del gas. Por otro lado, la configuración de los casos con el modelo integral se desarrolla en el apartado 3.2.

Las propiedades de los fluidos para los cálculos son las mismas que para el estudio experimental. Para el líquido se ha utilizado dipropilenglicol con $\rho_l = 1023 \text{ kg/m}^3$, $\mu_l = 0,075 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ y $\sigma = 0.032 \text{ N/m}$, mientras que para la fase gas se ha utilizado aire con $\rho_g = 1,2 \text{ kg/m}^3$ y $\mu_g = 14,8 \cdot 10^{-6} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. Para todos los casos se ha establecido una velocidad del sustrato $U_s = 0.34 \text{ m/s}$. La matriz de pruebas se resume en la Tabla 1, aunque con el modelo integral solo se ha probado el tercer caso de la tabla.

Tabla 1: Resumen de las características de los casos a estudiar.

\hat{Z}	$Z \text{ [mm]}$	$\Delta P_N \text{ [Pa]}$
19,4	25,22	425
19,4	25,22	875
14,2	18,46	425
14,2	18,46	875

3.1 Simulaciones 3D VOF LES

En la Figura 8 se pueden ver las dos variantes de la geometría del inyector. Si bien es cierto que tiene 3 ranuras por las que se puede inyectar el aire a presión, solo se utiliza la parte central para estos experimentos. Las ranuras situadas en la parte inferior y superior son utilizadas para probar distintos métodos de control del chorro, aunque para estos casos de prueba han permanecido sellados. Por tanto, la geometría se simplifica para los cálculos numéricos teniendo en cuenta únicamente el canal central abierto y el resto de canales se consideran parte del sólido. La única diferencia que existe entre las dos geometrías es que a la variante asimétrica se le ha quitado la pieza correspondiente a la parte inferior del mismo tal y como se ve en la Figura 8 (b). El estudio simultáneo de ambos casos nos puede aportar información interesante acerca de la influencia de la posición de las paredes externas del inyector en las recirculaciones que se producen alrededor del punto de impacto del chorro debido a la diferencia de confinamiento existente en la parte superior e inferior, especialmente para los cálculos numéricos ya que el dominio es limitado. Para el mallado de la geometría se han realizado simplificaciones en detalles puntuales que se consideran insignificantes para el cálculo del flujo con el fin disminuir la complejidad del proceso.

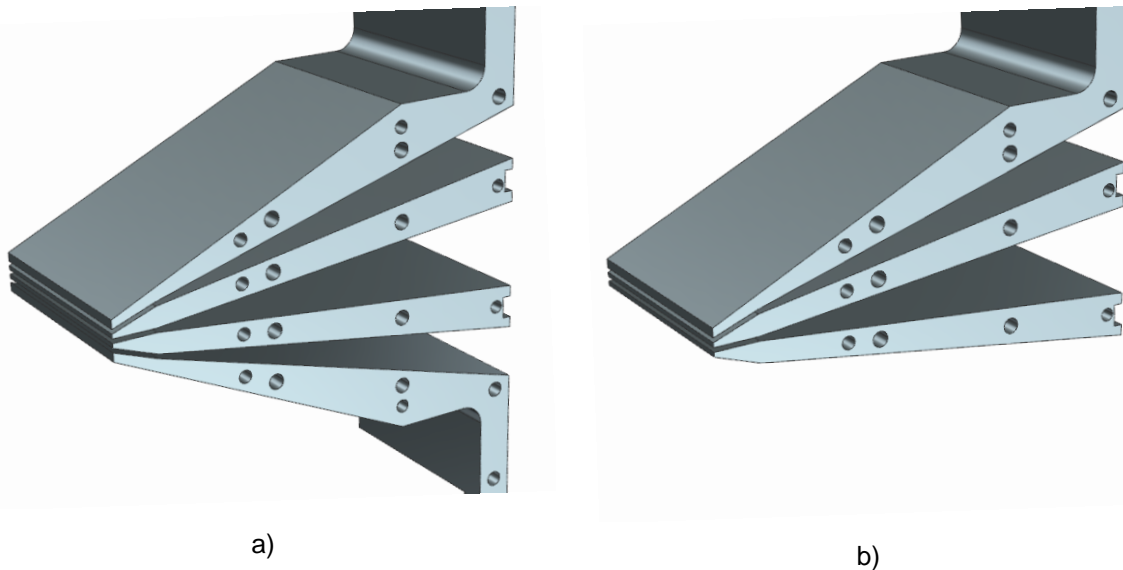


Figura 8: Representación 3D del inyector A para su variante simétrica (a) y asimétrica (b).

El mallado de las geometrías se ha realizado por medio de dos estrategias distintas. Inicialmente, se ha probado a utilizar ANSYS ICEM CFD® debido a su capacidad para crear mallas de una forma gráfica y a priori más sencilla, si bien se ha abandonado su uso debido a dos razones principales: la imposibilidad para generar geometrías y mallas de forma paramétrica y la menor capacidad de control de los parámetros de mallado en mallas estructuradas en bloques.

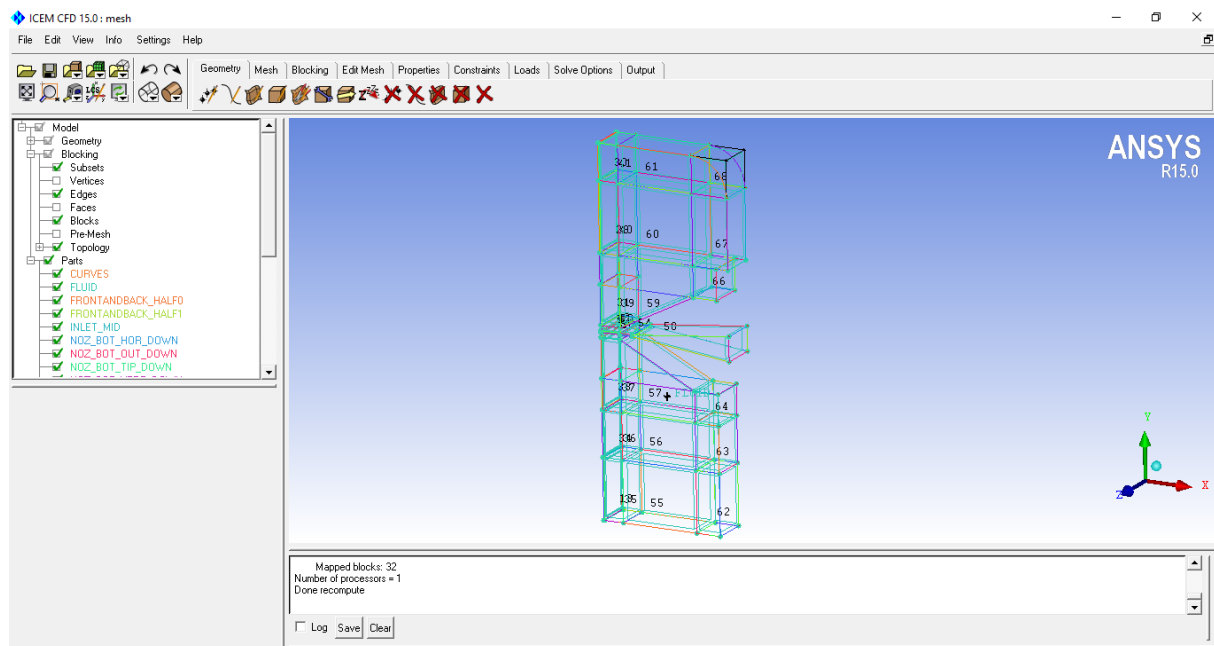


Figura 9: Captura de pantalla del proceso de mallado en ANSYS ICEM CFD®.

Es por ello que finalmente se ha decidido recurrir a *blockMesh*, un mallador nativo de OpenFOAM que a pesar de no tener interfaz gráfica -ya que se maneja por medio de líneas de código situadas en el fichero `system/blockMeshDict`- permite un diseño paramétrico que hace posible aplicar el mismo código con pequeñas adaptaciones para realizar variaciones en el mallado como refinamientos en la pared o cambios en alguna cota de la geometría sin tener que modificar nada más que alguna línea del código.

Lo primero que hay que hacer en el fichero *blockMeshDict* es definir los vértices que definen los bloques que se van a mallar. Estos bloques han de ser hexaédricos ya que de igual forma que OpenFOAM, incluso si queremos generar dominios 1D o 2D tenemos que definir bloques en 3D. Por otro lado, las aristas de los mismos pueden ser líneas rectas, curvas o splines. Esto hace posible su uso también para geometrías complejas, si bien es cierto que no es el mallador más recomendable debido a la ausencia de una interfaz gráfica que facilite el conformado de la geometría.

Una vez tenemos los bloques y aristas definidas, el proceso de generación de la geometría se daría por finalizado y se pasaría a la definición de los parámetros de mallado. En este paso es necesario definir los bloques en función de los vértices establecidos anteriormente, y no de cualquier forma ya que el orden del primer bloque fija los ejes para los cuales se definen los parámetros de mallado, lo mismo que ocurre para los bloques sucesivos. Cabe destacar una funcionalidad recogida a partir de la versión 2.4 que se conoce como *multigrading* y que disminuye al mínimo el número de bloques necesarios en el proceso de mallado ya que permite hacer divisiones de los mismos en cada dirección y aplicar parámetros diferentes a cada división generada. A continuación se muestra un extracto del *blockMeshDict* en el que se explica su uso.

```
blocks
(
  hex (0 1 2 3 4 5 6 7) // vertex defining the block
    (100 300 100)      // 100 cells in x, 300 cells in y, 100 cells in z
  simpleGrading
  (
    1 // x-direction expansion ratio
    (
      (0.2 0.3 4) // 20% y-dir, 30% cells, expansion = 4
      (0.6 0.4 1) // 60% y-dir, 40% cells, expansion = 1
      (0.2 0.3 0.25) // 20% y-dir, 30% cells, expansion = 0.25 (1/4)
    )
    3 // z-direction expansion ratio
  )
);
```

Para entenderlo más fácilmente, en la Figura 10 se muestra el bloque más cercano a la pared correspondiente a la salida del inyector. Este bloque, señalado por un rectángulo negro, estaría compuesto por 3 regiones diferentes que se muestran divididas por líneas rojas verticales. De izquierda a derecha, hay una región más cercana a la pared en la que se necesita una densidad de malla importante para capturar el comportamiento de la película con un ratio de expansión de las celdas que limite el número de celdas y haga una transición suave hacia una segunda región central de celdas algo más gruesas y de tamaño constante, que vuelve a disminuir en la última región en la que se disminuye algo el tamaño de las celdas para capturar el comportamiento del gas en contacto con la parte exterior del inyector.

Todos los casos han sido inicializados del mismo modo. El cálculo se comienza con 400 mm de baño de líquido en la parte inferior del tanque y una lámina de líquido de 1 mm de espesor pegado a la pared, la cual se comienza a mover con la velocidad vertical U_s . Una vez establecido el flujo al cabo de unos 0,2 se activa la presión en el chorro de gas y comienza el escurrido.

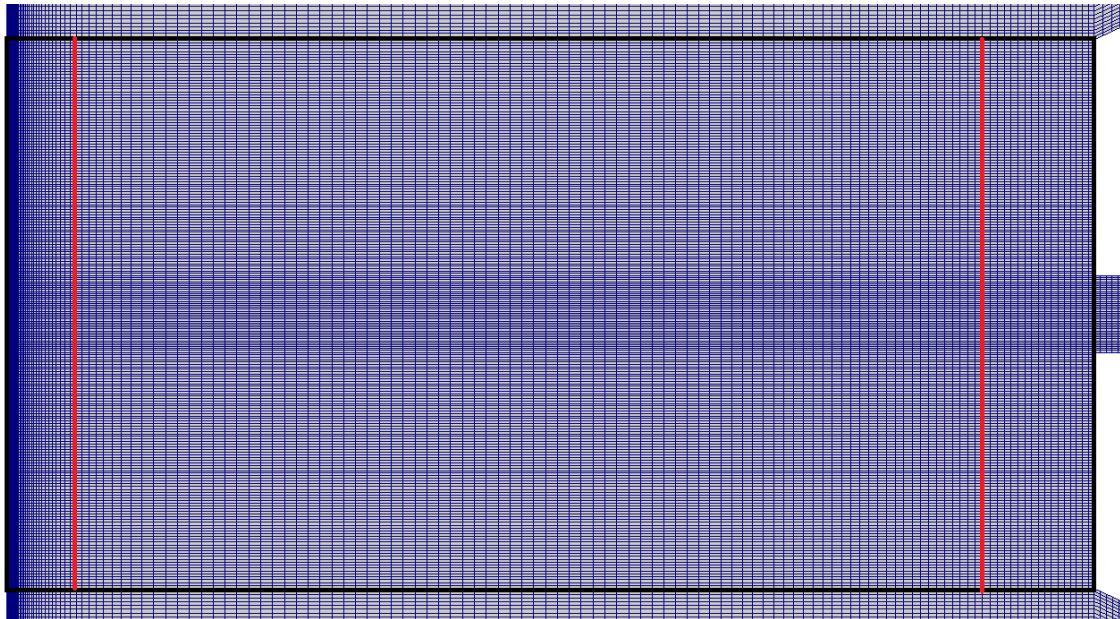


Figura 10: Ejemplo de comportamiento del multigrading de blockMesh aplicado a la zona situada entre la salida del chorro de gas y la pared. En negro se resalta el dominio del bloque y las líneas verticales rojas resaltan las divisiones entre las regiones del mismo.

A continuación, en la Figura 11 se muestra un resumen de las características principales de la malla para los cálculos con la variable simétrica del inyector, que se extiende 30 mm en la dirección perpendicular al plano del papel. El espesor de la primera capa de celdas pegadas a la pared de la película tiene en todos los casos un espesor de $2 \mu\text{m}$ para conseguir una buena resolución en la película. Como consecuencia, el número de celdas de las mallas varía entre 10,5 y 12 millones de celdas según el inyector y la distancia de escurrido.

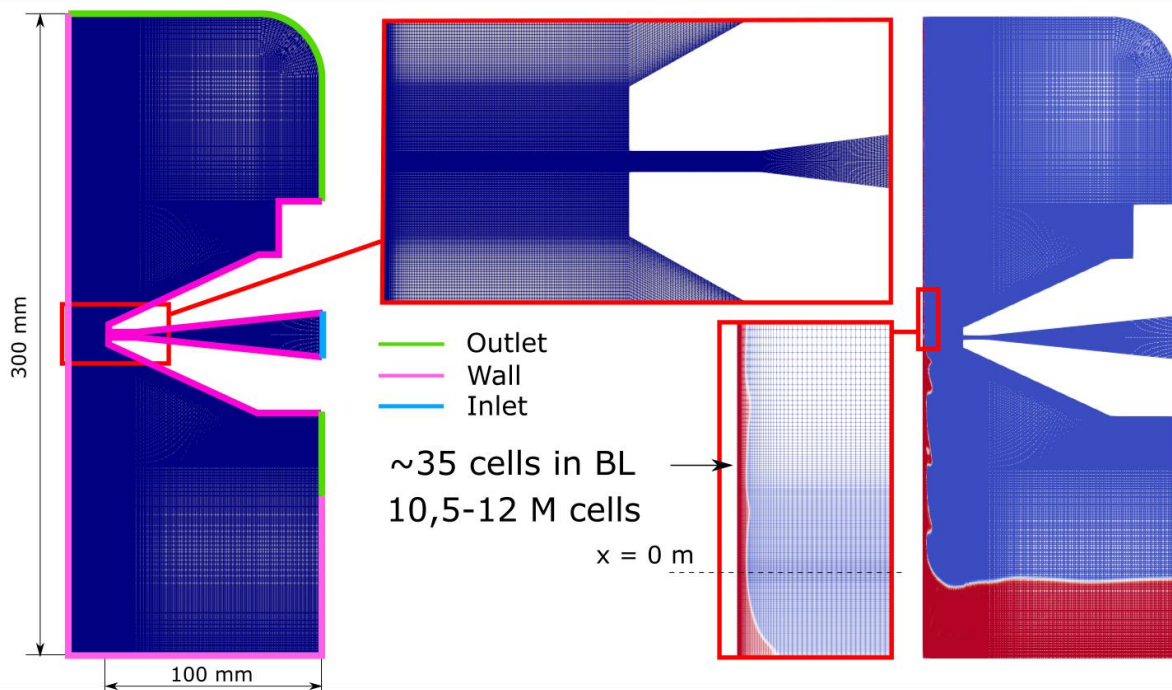


Figura 11: Resumen de las características principales de la malla y condiciones de contorno aplicadas para los cálculos 3D VOF LES.

Se ha realizado un estudio de escalabilidad para encontrar el número óptimo de procesadores en paralelo. Tal y como muestra la Figura 12 en la que se representa el número de procesadores frente al tiempo de flujo real calculado por día, el óptimo está situado alrededor de los 288, en la cual también se observa un valor anormalmente bajo para el cálculo con 192 procesadores, provocado probablemente por un fallo en alguno de los procesadores involucrados que limita la velocidad del resto, si bien incluso hablando con el personal técnico del sistema no se ha llegado a encontrar una razón concreta. El paso de tiempo está por debajo de los 10^{-6} s y es adaptable basado en el número de Courant, que tiene que ser menor que 1 para que durante un paso de tiempo Δt una partícula fluida no atraviese más de una celda de tamaño Δx .

$$CFL = \frac{u \Delta t}{\Delta x}$$

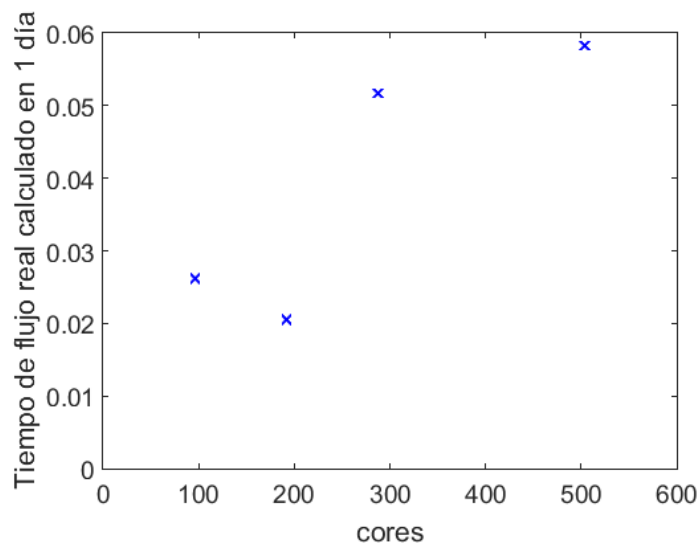


Figura 12: Resultados del estudio de escalabilidad.

Como resultado, han sido necesarias alrededor de 500 – 700 h de cálculo por segundo de tiempo físico para cada caso, así como también ha sido muy exigente en términos de almacenamiento llegando a ocupar unos 275 GB por segundo. El tiempo obtenido para cada caso varía al aplicar presiones y mallas distintas, pero se sitúa alrededor de 1.5 s para los casos más favorables y de 1 s para los más desfavorables, excluyendo ya el tiempo transitorio hasta que el flujo está establecido.

Los aspectos relacionados con la configuración numérica del caso se detallan a continuación:

- **Solver:** *interFoam* (incompresible, isotérmico, transitorio, multifásico basado en la metodología Volume of Fluid).
- **Turbulencia:** LES Smagorinski ($C_S = 0,158$).
- **$CFL = 0,96$.**
- **Término temporal:** Euler.
- **Término convectivo:** Gauss linear.
- **Término de gradiente:** Gauss linear.
- **Término difusivo:** Gauss linear corrected.

Todos estos casos han sido inicializados del mismo modo. El cálculo se comienza con 400 mm de baño de líquido en la parte inferior del tanque y una lámina de líquido de 1 mm de espesor pegado a la pared, la cual se comienza a mover con la velocidad vertical U_s . Una vez establecido el flujo al cabo de unos 0,2 se activa la presión en el chorro de gas y comienza el escurrido.

3.2 Simulaciones mediante modelo integral

Los cálculos con este modelo se reducen al análisis unidimensional de la película a lo largo del sustrato. Esto quiere decir la malla solo está discretizada en dicha dirección tal y como se ve en la Figura 13, donde también se resumen las condiciones de contorno aplicadas. Se puede apreciar una suave transición en la densidad de la malla cerca de los extremos del dominio con el fin de evitar y amortiguar posibles problemas con las condiciones de contorno. Para el sustrato se define un valor fijo de la velocidad ($U_s = 0,34 \text{ m/s}$) y gradiente nulo para el espesor. El tamaño de las celdas en la zona central es de $100 \mu\text{m}$. A diferencia de los cálculos de alta fidelidad las mallas tienen un número de celdas mucho más reducido, siempre por debajo de las 5000 celdas.

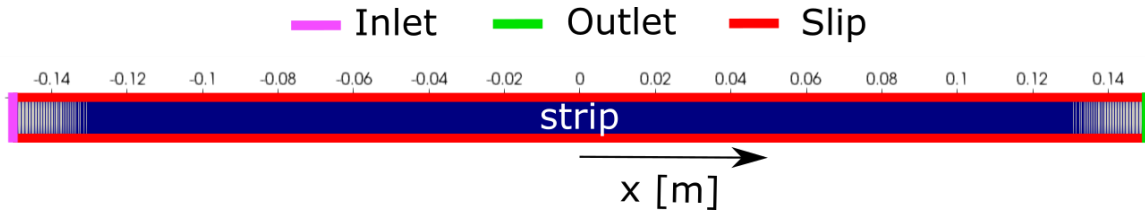


Figura 13: Resumen de las características principales de la malla y condiciones de contorno aplicadas para los cálculos con el modelo integral.

La inicialización de los cálculos se ha realizado básicamente de dos maneras, ya que con este modelo no se puede simular el arrastre partiendo de un baño de líquido, tal y como se ha hecho hasta ahora. Por un lado, se ha probado a inicializar el cálculo con un espesor y velocidad constantes a lo largo del dominio para representar el arrastre de la película antes del escurrido. Por otro, con el objetivo de ayudar al modelo a evolucionar de forma más suave hacia la solución cuando comienza la acción del chorro, se ha inicializado el cálculo con la solución del modelo 1D basado en las teorías de lubricación bajo las mismas condiciones de escurrido. La configuración numérica de los casos se muestra a continuación.

- **Solver:** *reactingParcelFilmFoam + kinematicSingleLayer*
- **CFL** = 0,3.
- **Término temporal:** Euler.
- **Término convectivo:** Gauss upwind.
- **Término de gradiente:** Gauss linear.
- **Término difusivo:** Gauss linear uncorrected.

Para finalizar este capítulo y dar una idea de los altos requerimientos técnicos necesarios en particular para los cálculos de alta fidelidad, cabe comentar que se han tenido que realizar dos solicitudes a la Red Española de Supercomputación (RES). Esto ha permitido correr las simulaciones en el supercomputador Finisterrae II del CESGA (Centro de Supercomputación de Galicia) bajo la solicitud FI-2018-3-0040 y en el Tirant de la Universidad de Valencia bajo la solicitud FI-2019-1-0044, cubriendo un total de 8 meses con más de 3 millones de horas asignadas.

4 PROCESADO DE RESULTADOS

En capítulos anteriores se ha hablado de la elevada cantidad de datos que generan las simulaciones. Estos datos, por sí mismos no tienen ningún significado, por lo que debido a su importancia, en este capítulo se trata de resumir la manera en la que se ha llevado a cabo el procesado de los mismos. Esto incluye tanto la reducción de su tamaño al mínimo, como la obtención de las características más importantes partiendo de los valores que adquieren las variables en las celdas. El capítulo se divide en dos partes: en una de ellas se explica la preparación de scripts de Python para realizar procesados en ParaView de forma automática, y una segunda parte en la que se presentan los algoritmos de Octave utilizados para realizar análisis más personalizados como la obtención de los perfiles promediados, los mapas de espesores o la frecuencia de las ondas entre otros.

4.1 Visualización gráfica

La herramienta más comúnmente utilizada en OpenFOAM para el procesado de resultados es ParaView. Este es un software libre de procesado y visualización de resultados multiplataforma que permite trabajar con los datos obtenidos en las simulaciones con sencillez por medio de una interfaz gráfica.

Debido al tamaño de las mallas y la utilización del software por red en remoto desde los clústeres, el tiempo necesario para llegar a obtener una captura de pantalla de forma interactiva con la interfaz gráfica llega a ser tan alta que hace imposible su utilización. La mejor alternativa a esto es el desarrollo de scripts de Python que cargan el módulo *paraview.simple*, capaz de acceder a todas las funcionalidades de ParaView sin tener que recurrir a la interfaz gráfica y que además permite ser ejecutado en un clúster en paralelo. Esto requiere un esfuerzo inicial en cuanto a la preparación de los scripts, si bien consigue acelerar en gran medida la realización de procesados.

Además, para facilitar el desarrollo de los scripts, la GUI de ParaView integra una funcionalidad (Tools > Start Trace) que traduce los comandos aplicados en la interfaz gráfica en líneas de código de Python que ejecuta las mismas tareas. De esta forma, para cada tipo de procesado hay que llevar a cabo esta metodología una vez, y adaptar posteriormente el script para extenderlo al resto de casos, permitiendo añadir funcionalidades extra o eliminar líneas que no son necesarias e internamente ralentizan el procesado. Para operar de una forma todavía más automática, se incluyen una serie de líneas de código basadas en el módulo *os* con el fin de operar con directorios, de tal forma que al ejecutar el script desde la carpeta que contiene el caso, automáticamente detecta el fichero *.foam* y crea las carpetas en las que guarda las capturas, de tal forma que ni siquiera es necesario entrar a cambiar rutas ni nombres de archivos para cada caso. A continuación, se muestra el código utilizado para obtener capturas como la Figura 28 junto con comentarios que explican por encima la misión de cada parte del código.

```
#### import the simple module from the paraview
from paraview.simple import *

import os                #to enable directories manipulation
path = os.getcwd()

final = 1600             #final time step to be recorded

### automatic recognition of the foam file to load inside the case folder
print ("The current working directory is %s" % path)
```



```
foam_file = [f for f in os.listdir(path) if f.endswith('.foam')]
foam_file = path + str("/") + foam_file[0]

# Loading the foam file with options
jW_Miguel_Z18foam = OpenFOAMReader(FileName=foam_file)
jW_Miguel_Z18foam.CaseType = 'Reconstructed Case'

jW_Miguel_Z18foam.MeshRegions = ['internalMesh']
jW_Miguel_Z18foam.CellArrays = ['alpha.phase1']

# get animation scene
animationScene1 = GetAnimationScene()

# get active view
renderView1 = GetActiveViewOrCreate('RenderView')
# uncomment following to set a specific view size
# renderView1.ViewSize = [1450, 630]

# create a new 'Clip' to represent the liquid phase
clip1 = Clip(Input=jW_Miguel_Z18foam)
clip1.ClipType = 'Scalar'
clip1.Scalars = ['POINTS', 'alpha.phase1']
clip1.Value = 0.50
clip1.Invert = 0

# show liquid phase in blue
clip1Display = Show(clip1, renderView1)
# trace defaults for the display properties.
clip1Display.Representation = 'Surface'
clip1Display.ColorArrayName = [None, '']
clip1Display.DiffuseColor = [0.3333333333333333, 0.6666666666666666, 1.0]

# create a new 'OpenFOAMReader' to show the gas velocity field based on front patch
jW_Miguel_Z18foam_1 = OpenFOAMReader(FileName=foam_file)
jW_Miguel_Z18foam_1.MeshRegions = ['frontAndBack_half1']
jW_Miguel_Z18foam_1.SkipZeroTime = 0
jW_Miguel_Z18foam_1.CaseType = 'Reconstructed Case'
jW_Miguel_Z18foam_1.CellArrays = ['U', 'alpha.phase1']

# create a new 'Clip' to represent only the gas field
clip2 = Clip(Input=jW_Miguel_Z18foam_1)
clip2.ClipType = 'Scalar'
clip2.Scalars = ['POINTS', 'alpha.phase1']
clip2.Value = 0.50
clip2.Invert = 1

# show the clip based on the velocity field
clip2Display = Show(clip2, renderView1)
# trace defaults for the display properties.
clip2Display.Representation = 'Surface'
clip2Display.ColorArrayName = [None, '']
clip2Display.OSPRayScaleArray = 'U'
clip2Display.OSPRayScaleFunction = 'PiecewiseFunction'
clip2Display.SelectOrientationVectors = 'U'

# set scalar coloring
ColorBy(clip2Display, ('POINTS', 'U', 'Magnitude'))

# rescale color and/or opacity maps used to include current data range
clip2Display.RescaleTransferFunctionToDataRange(True, False)

# show color bar/color legend
clip2Display.SetScalarBarVisibility(renderView1, True)

# get color transfer function/color map for 'U'
```

```
uLUT = GetColorTransferFunction('U')

# get color legend/bar for uLUT in view renderView1
uLUTColorBar = GetScalarBar(uLUT, renderView1)
uLUTColorBar.Title = 'U'
uLUTColorBar.ComponentTitle = 'Magnitude'

# change scalar bar placement
uLUTColorBar.WindowLocation = 'AnyLocation'
uLUTColorBar.Position = [0.036551724137931056, 0.44444444444444444]
uLUTColorBar.ScalarBarLength = 0.33000000000000007

# set active source
SetActiveSource(clip2)

# get opacity transfer function/opacity map for 'U'
uPWF = GetOpacityTransferFunction('U')
uPWF.Points = [0.0, 0.0, 0.5, 0.0, 0.48717696409129546, 1.0, 0.5, 0.0]
uPWF.ScalarRangeInitialized = 1

# Rescale the limits of the color legend
uPWF.RescaleTransferFunction(0.0, 40.0)
uLUT.ApplyPreset('Blue to Red Rainbow', True)

#change mode for render view
renderView1.InteractionMode = '2D'

# create a new 'Text' to show the nozzle stagnation pressure
text1 = Text()
text1.Text = 'P = 875 Pa'
text1Display = Show(text1, renderView1)
text1Display.WindowLocation = 'AnyLocation'
text1Display.FontSize = 24
text1Display.Position = [0.040837, 0.270210]

# create a new 'Text' to show the standoff distance
text2 = Text()
text2.Text = 'Z = 25 mm'
text2Display = Show(text2, renderView1)
text2Display.WindowLocation = 'AnyLocation'
text2Display.FontSize = 24
text2Display.Position = [0.040911, 0.210552]

# create a new 'Annotate Time Filter' to represent the time
annotateTimeFilter1 = AnnotateTimeFilter(Input=text2)
annotateTimeFilter1.Format = 'Time: %4.3f s'
annotateTimeFilter1Display = Show(annotateTimeFilter1, renderView1)
annotateTimeFilter1Display.FontSize = 24
annotateTimeFilter1Display.WindowLocation = 'AnyLocation'
annotateTimeFilter1Display.Position = [0.039924, 0.332005]

# current camera placement for renderView1
renderView1.InteractionMode = '2D'
renderView1.CameraPosition = [0.0432883215446804, -0.14618323542939,
0.566390489498139]
renderView1.CameraFocalPoint = [0.0432883215446804, -0.14618323542939,
0.0149999996647239]
renderView1.CameraParallelScale = 0.0554630179451999

# automatic screenshots directory creation in the case folder
path = path + str('/screenshots2D')
try:
    os.mkdir(path)
except OSError:
    print ("Creation of the directory %s failed" % path)
```

```
else:
    print ("Successfully created the directory %s " % path)

filename_root = "{}{}{}".format(path, "/screenshot_animation2D_t" )
ext = '.png'

# loop to obtain the screenshots from 0 to the final time step specified at the
beginning of the file

for i in range (0, final):
    print ("Taking screenshot number %s " % i)
    renderView1.ViewTime = 0.2+i*0.001
    # save screenshot
    SaveScreenshot("{}{}{}{}".format(filename_root, str(i),ext ), renderView1,
ImageResolution=[1450, 630], OverrideColorPalette='PrintBackground',FontScaling='Do
not scale fonts')
```

4.2 Procesado

Esta es la parte fundamental del post-procesado de resultados. Más allá de ver el comportamiento general del proceso de escurrido, se analizan de forma detallada las variables fundamentales que describen el comportamiento tanto del chorro de gas como de la película líquida. A su vez, está compuesto por diferentes etapas que vienen resumidas en la Figura 14 y que se describen en profundidad en los apartados sucesivos.

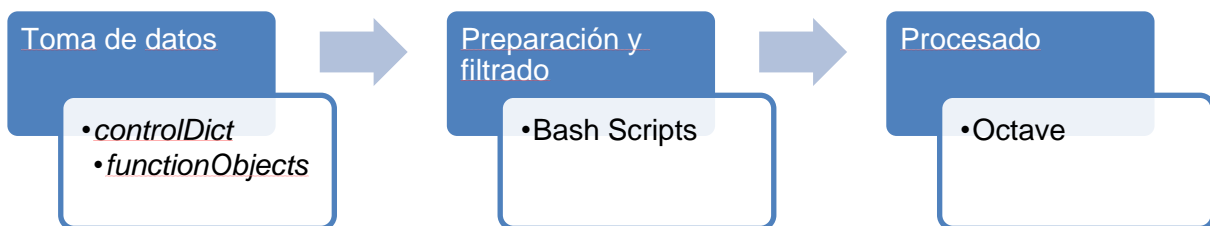


Figura 14: Flujo de trabajo para el procesamiento de resultados de las simulaciones.

Para el procesado, se ha escogido Octave por ser un lenguaje de programación científico gratuito disponible en todas las máquinas utilizadas en este proyecto, lo que ha permitido correr trabajos de procesado intensivamente durante largos periodos de tiempo.

Por otro lado, aunque el procesado final se haya realizado en Octave, se ha requerido el uso de otras herramientas como los *functionObjects* del *controlDict* para obtener los planos verticales de análisis, y scripts en bash para reducir y filtrar los mismos.

4.2.1 Toma de datos

Este es el primer paso y por ello adquiere especial importancia, ya que aquí se decide la forma en la que los datos se extraen de los valores de las variables almacenadas en las celdas de la malla. Cabe destacar que no hay una única forma de llevar a cabo este proceso, pero sí es importante decidir una estrategia coherente con los datos que se quieren extraer. Por ejemplo para este caso en el que compararemos con los resultados experimentales, por similitud, nos conviene tomar planos verticales en el centro del dominio respecto a los planos de simetría. La forma más común de llevar a cabo este tipo de operaciones es mediante herramientas de post-procesado que escriben estos resultados en run-time y que se conocen como *functionObjects*. Para definirlos, es necesario modificar el *controlDict* añadiendo las líneas con las funciones de post-procesado, tal y como se muestran a continuación para el caso del plano vertical de análisis.

```
functions
{
    midPlane
    {
        type                surfaces;
        functionObjectLibs  ("libsampling.so");
        enabled              true;
        outputControl        outputTime;
        outputInterval       1;
        surfaceFormat        raw;
        interpolationScheme   cellPointFace;
        fields
        (
            p
            U
            alpha.phase1
        );

        surfaces
        (
            midplane
            {
                type          plane;
                planeType      pointAndNormal;
                pointAndNormalDict
                {
                    normal      (0 0 1);          #normal to the plane of analysis
                    point        (0 0 0.015);     #reference point
                }
                interpolate     true;
            }
        );
    }
}
```

En este caso, lo más importante es definir correctamente el plano de análisis, que se define en base a su normal y un punto de referencia. Se establece como formato de escritura el tipo *raw* en vistas de que será un formato cómodo para la lectura en Octave, ya que tendremos una lista con el conjunto de puntos sobre los que se interpolan los valores de las celdas junto con los correspondientes valores de presión, velocidad, y fracción de volumen.

Existen multitud de opciones diferentes en cuanto a operaciones sobre los campos o toma de muestras de valores de variables en el tiempo para distintos puntos del dominio entre otros. Para más información se recomienda consultar la guía de usuario de OpenFOAM. El resultado de este paso es una carpeta que por defecto toma el nombre de *postProcessing/* en la que internamente guarda el resultado de ejecutar las funciones en una subcarpeta con el nombre que le hemos dado a la función, en este caso *midPlane/* que almacena para cada paso de tiempo un fichero *raw* para cada variable que indiquemos.

4.2.2 Preparación y filtrado

En condiciones normales, esta etapa no suele ser necesaria debido a que la cantidad de datos no es tan grande como para justificar el desarrollo de algoritmos que preparen y filtren los ficheros de salida. Para este caso, la carpeta de *postProcessing/* llega a ocupar unos 100 GB de los cuales la mayoría no se aprovechan por dos motivos claros. Por un lado, hay información duplicada al generar un fichero para cada variable fluida, ya que se están repitiendo para todos ellos los valores de las coordenadas de los puntos en las 3 direcciones. Por otro, mientras que el plano de análisis se extiende a todo el dominio, las ventanas de interés son de un tamaño mucho más reducido, siempre situadas en las inmediaciones de la salida del inyector y a lo largo del substrato para llevar a cabo la detección de la interfaz.

Aquí, se propone generar un único fichero que recoja en columnas los siguientes datos: coordenada en x, coordenada en y, componente x de la velocidad, componente y de la velocidad, valor de α , y valor de la presión. Además, se eliminan las cabeceras de forma que facilita la posterior importación en Octave.

Dado que los clústeres utilizan un sistema basado en Linux, y debido a la multitud de opciones que ofrece en cuanto a manipulación de archivos, se ha decidido utilizar scripts en bash. A continuación, se muestra el script utilizado con el que se consigue reducir el número de archivos a un tercio y que ocupa un 3% de los datos generados en la etapa anterior.

```
#!/bin/bash
#$ -S /bin/bash
#$ -cwd
#$ -V

#Creation of the directory where the new files will be stored
mkdir mergedRaws

#Moving to the directory where the midplanes are stored
cd postProcessing/midPlane

#Checking how many time steps have to be processed
e=$(find . -mindepth 1 -maxdepth 1 -type d | wc -l)
folders=( $(ls -d */) )
len=${#folders[@]}
let len=len-1

#Loop over the timesteps
for i in `seq 0 $len`;
do
    #Entering a certain time step folder
    folders[i]=${folders[i]%/}
    echo Filtering surface for "${folders[i]}" s
    cd ${folders[i]}

    #Merging the different files and removing the headers
    cut -d " " -f4 alpha.phase1_midplane.raw | paste -d " " U_midplane.raw -
>midPlane
    cut -d " " -f4 p_midplane.raw | paste -d " " midPlane - >midPlane1
    cut -d ' ' -f 1,2,4,5,7,8 midPlane1 >midPlane2
    mv midPlane2 midPlane.raw
    sed -i.bak '1,2d' midPlane.raw

    #Reducing data to -0.119>y>-0.201 && x<0.01 window
    awk '($2 < -0.119 && $2 > -0.201 && $1 < 0.01)' midPlane.raw >
filteredRaw"$i".raw

    #Moving the filtered data and cleaning the old files
    cp filteredRaw"$i".raw ../../../../mergedRawsBigWindow
    rm filteredR*

    #Going back in the general folder to start again with the new time step
    cd ../
done

echo Filtering finished!
```

4.2.3 Extracción de parámetros de interés

Una vez completado el paso anterior, los datos se encuentran listos para ser utilizados en el procesado final de las características más importantes del proceso. En este capítulo se explica de la lógica seguida en el diseño de los algoritmos de procesado de forma aislada para la película líquida y el gas. Cabe destacar la importancia que adquiere este capítulo teniendo en cuenta la cantidad de datos a procesar, así como el rigor requerido en su diseño para conseguir realizar una comparación directa con los resultados experimentales.

4.2.3.1 Caracterización del comportamiento del chorro de gas

Para la caracterización del chorro de gas se busca promediar una ventana espacial similar a la utilizada en los experimentos por medio de la metodología TR-PIV, de forma que la comparativa es lo más directa posible. Para llevar esto a cabo, se genera una malla que se extiende a lo largo de un dominio $x \in [-0,02 ; 0,01]$ e $y \in [0 ; Z]$ con un tamaño de celda de $50 \mu m$ en ambas direcciones para tener una definición suficientemente buena.

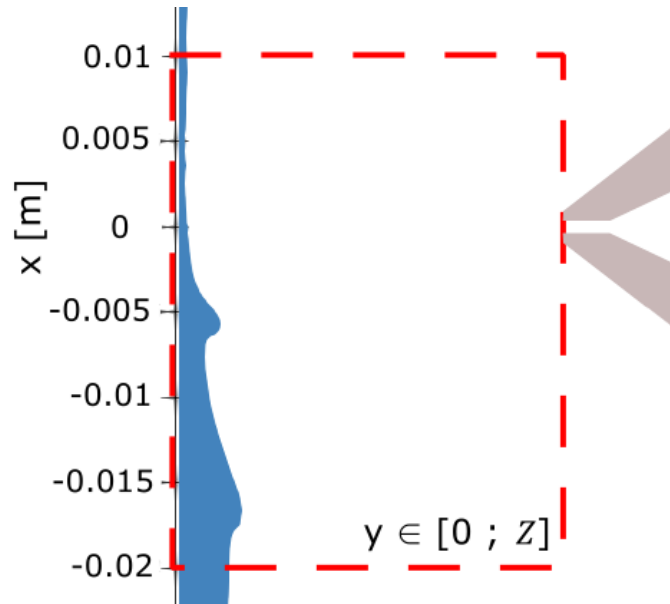


Figura 15: Esquema representativo de la ventana espacial de análisis.

El cálculo del promedio se realiza recorriendo la carpeta con los ficheros de cada paso de tiempo para interpolar los valores puntuales de las componentes x e y de la velocidad de los planos sobre las celdas de la malla, almacenando en cada una la suma de los valores de las variables hasta el momento. Para obtener el valor promedio, una vez se han recorrido todos los pasos de tiempo se dividen los valores acumulados de velocidad entre el número de ficheros utilizados. A continuación, partiendo de los valores de las componentes, se computa el valor de la magnitud $U = \sqrt{U_x^2 + U_y^2}$. Las líneas de corriente se construyen a través de los valores de las componentes de la velocidad, mientras que la parte del líquido se cubre con el perfil promediado de espesores.

4.2.3.2 Caracterización del comportamiento de la fase líquida

Este ha sido uno de los puntos más problemáticos en cuanto al procesado de resultados. El principal reto en cuanto a la caracterización del comportamiento del líquido es la detección de la interfaz. Si bien parece una tarea sencilla ya que la reconstrucción de la interfaz en la

metodología VOF se tiende a reducir a encontrar la celda con valor $\alpha = 0,5$. En la realidad el problema es mucho más complejo, ya que el valor de α puede tomar infinitos valores entre 0 y 1. Además, para el caso que nos ocupa y en especial para presiones altas en el inyector, se producen eyecciones de líquido así como burbujas de aire dentro de la película, lo que dificulta enormemente definir un espesor para cada posición específica del sustrato. A este problema, hay que añadir que la definición espacial de los datos ha de ser suficientemente pequeña para que la señal del espesor no sea excesivamente abrupta ni ruidosa, ya que de esa manera interferirá en los posteriores análisis como la identificación de las frecuencias de las ondas y la velocidad de las mismas.

En este sentido, se han ido probando distintas estrategias en base a los problemas encontrados. Inicialmente, de igual manera a lo que se ha realizado para el campo de velocidades, se utiliza una ventana de datos para mapear sobre la malla anteriormente definida, siendo esta lo suficientemente grande como para que pueda capturar las ondas más grandes en el runback. El tamaño de celda en este caso es de $25 \mu m$ para x y $10 \mu m$ para y , de forma que se recupere con precisión la interfaz. Si extendemos esto a todos los pasos de tiempo, podremos construir una matriz de espesores en la que las filas son las coordenadas xy y las columnas los instantes de tiempo considerados. Con esto, se puede construir un mapa de colores como el de la

Figura 16 en el que se ve claramente el patrón de formación de ondulaciones. Por otro lado, volviendo sobre el tema del almacenamiento de datos, la matriz de evolución temporal de la película ocupa solo unos 40 MB, muy lejos de los 100 GB iniciales.

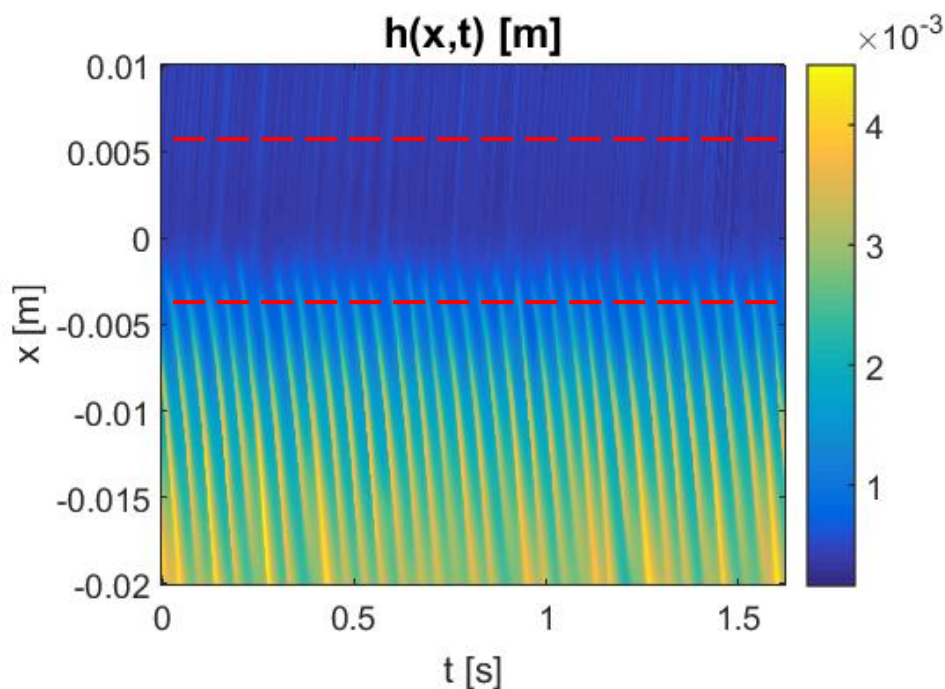


Figura 16: Evolución espacio-temporal de la interfaz del líquido en el que se destacan los puntos de análisis para el análisis frecuencial de las ondas del runback y de la película final.

Este mapa espacio-temporal de espesores sirve como punto de partida para otros estudios posteriores. Por ejemplo, partiendo de esta información se ha llevado a cabo un análisis frecuencial basado en la densidad espectral de potencia \mathcal{H} para cada coordenada x . De esta forma, se recorre la matriz de espesores por filas (cada una representa la evolución temporal de una posición x) restando al perfil el valor medio en el tiempo, y por último calculando la densidad espectral de potencia por medio de la función *pwelch* de Octave.

Además, para poder ver las frecuencias más energéticas en cada punto se adimensionaliza para todas las posiciones, ya que si no solo aparecerían reflejadas las frecuencias más energéticas en todo el dominio, comúnmente situadas en el runback y perderíamos información en la película final. Así, en la Figura 17 se muestra un mapa de frecuencias típico del que claramente se pueden ver las frecuencias para todo el dominio.

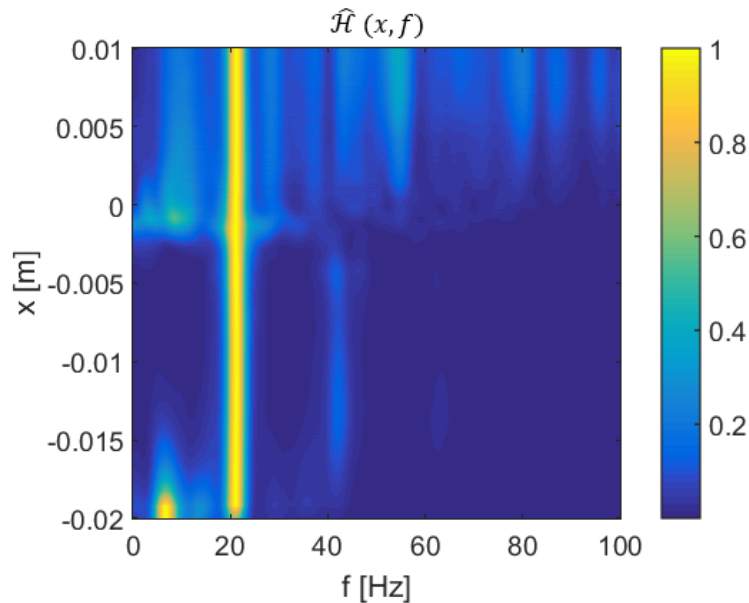


Figura 17: Mapa de densidad espectral de potencias adimensionalizada (\hat{H}) para la evolución temporal del espesor.

Si se desea tener una información más precisa, se puede analizar una coordenada determinada en el runback ($x = -0.005 m$) y otra para la película final ($x = 0,005 m$), tal y como se muestra con las líneas discontinuas rojas en la

Figura 16. Partiendo de esta información se pueden obtener las frecuencias presentes en las ondulaciones en ambas regiones, tal y como se muestra en la Figura 18.

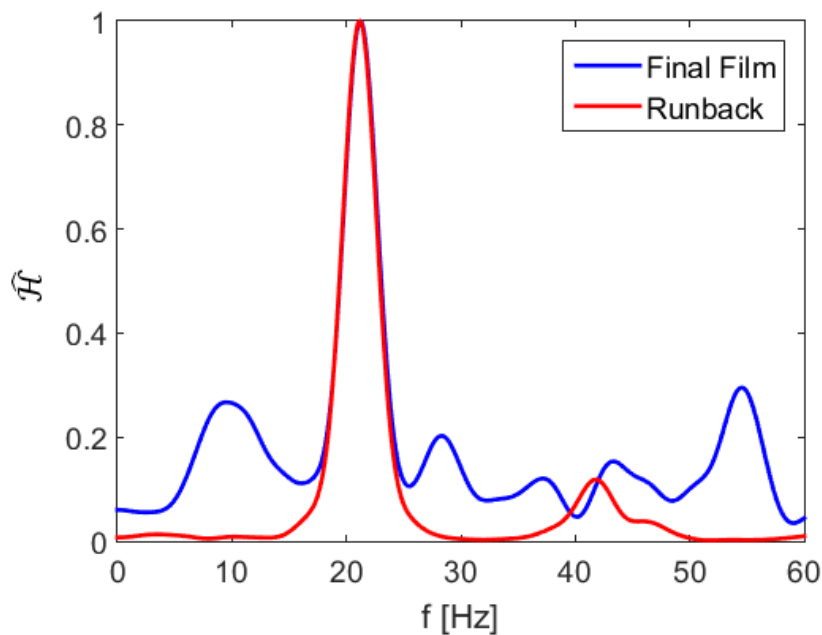


Figura 18: Densidad espectral de potencia adimensionalizada (\hat{H}) para cada una de las posiciones de análisis.

Este tipo de procesado es suficiente para tener un buen espectro en el runback, aunque debido a que en la película final el espesor es menor, cualquier interferencia debida a la densidad de la malla o detección incorrecta de la interfaz provoca que el espectro de frecuencias sea de menor calidad, a veces llegando a desdibujar por completo los resultados como se ve para alguno de los casos analizados.

En base a estos datos, también se puede realizar un estudio de la velocidad de propagación de las ondas por medio de un algoritmo de correlación cruzada. Para ello, partiendo de las posiciones de referencia definidas anteriormente, se realiza sistemáticamente la correlación cruzada de la evolución temporal de espesor para esa posición y posiciones posteriores. Es decir, para el caso de la película final, compararemos la señal para $x = 0,005 m$ con la señal para todas las posiciones hasta $x = 0,01 m$. Para el runback, se utiliza como referencia la señal de $x = -0,01 m$ y se compara para todo el rango hasta $x = -0,02 m$. De esta forma, obtenemos unos mapas de colores del operador \hat{R} de correlación cruzada como los de la Figura 19 y Figura 20. Aquí, se puede ver cómo la correlación máxima se va alejando en tiempo conforme distanciamos los dos puntos de referencia. La pendiente dibujada por los máximos del operador \hat{R} representa la velocidad a la que viajan las ondas.

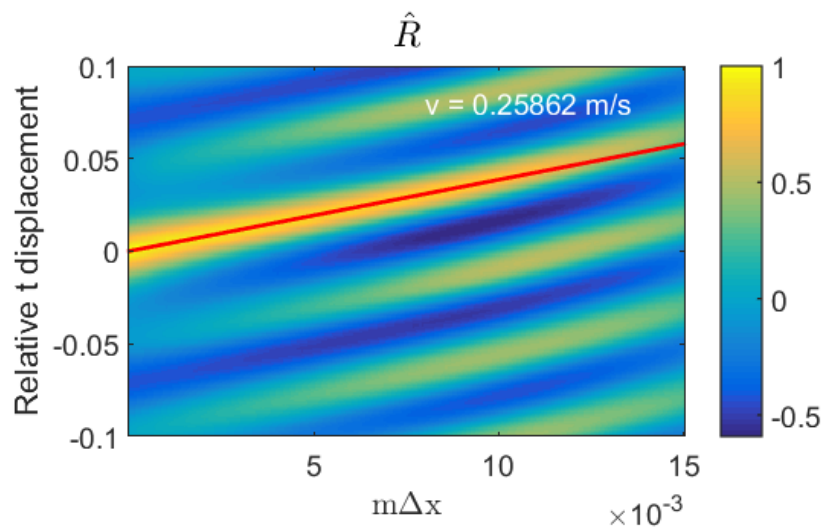


Figura 19: Mapa de colores para el operador de correlación \hat{R} en función de la distancia a la coordenada de referencia para el caso de la película final.

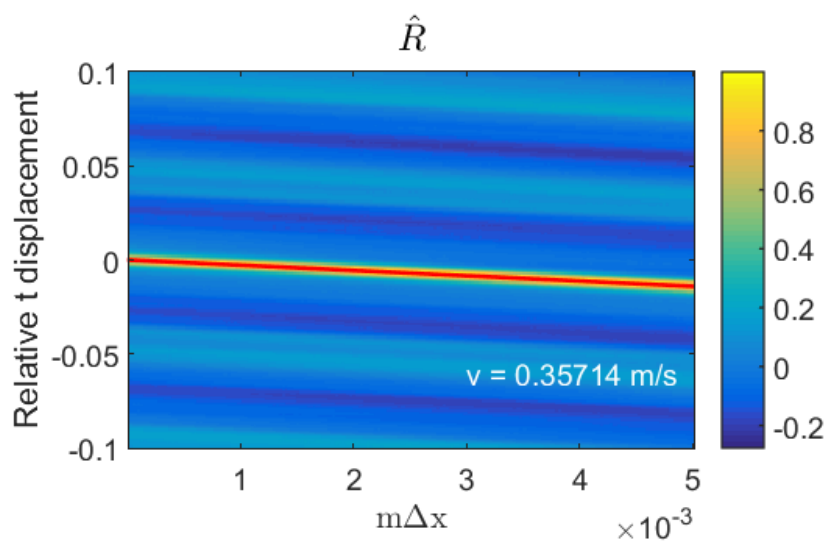


Figura 20: Mapa de colores para el operador de correlación \hat{R} en función de la distancia a la coordenada de referencia para el caso del runback.

Es importante hacer notar que la región de análisis es reducida, especialmente en la zona de la película final. Además, debido a la influencia de la tensión superficial y acción del chorro, los valores de espesor medio y amplitud de las oscilaciones son muy dependientes de la distancia al punto de impacto. Por ello, se ha decidido llevar un procesado alternativo para la película final en el que ahora no se hace uso de malla de ningún tipo, si no que se utiliza directamente el valor de α en los puntos. Con esto, ganamos en precisión y por ello la señal será mucho más suave. Como contrapartida, por razones computacionales obvias no se puede realizar una detección de la interfaz para cada coordenada x , si no que el estudio se reduce a llevar a cabo el seguimiento temporal del espesor para 6 posiciones específicas: $x = [0,02: 0,02: 0,12]$. Estas señales tienen una calidad mayor que las obtenidas en base a los mapas temporales. Aun así, se lleva a cabo un filtrado de la señal para evitar que el poco ruido que pudiese quedar nos afecte a los estudios posteriores. En la Figura 21 se ve la señal temporal de espesores original junto con la filtrada, donde se puede apreciar cómo suaviza la señal sin modificar excesivamente la forma original, lo cual ha sido también probado de forma cuantitativa comparando el valor promedio del espesor para los dos casos.

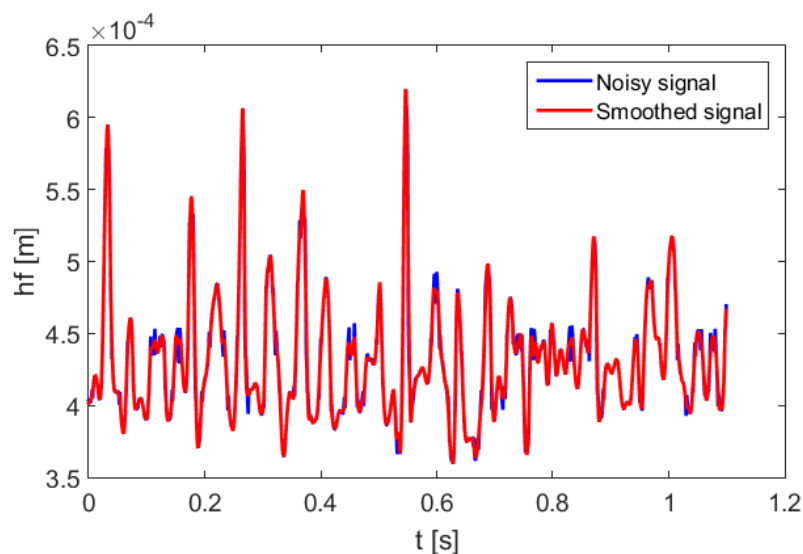


Figura 21: Comparativa de la señal temporal de espesores original con la misma filtrada.

Sobre la señal filtrada se realizan algunos de los análisis comentados anteriormente. Mientras que las frecuencias obtenidas son similares, la diferencia principal está en el resultado de la correlación cruzada. Esto ocurre en parte por el aumento de la precisión en la detección de la interfaz y de la distancia entre los puntos de análisis que hace que disminuya la influencia de la baja precisión temporal debida al paso de tiempo ($\Delta t = 0,001 \text{ s}$), y a que en estas posiciones la influencia del chorro es menor.

El algoritmo de correlación cruzada detecta que la correlación entre señales es máxima para un determinado número de pasos de tiempo (Figura 22), que se convierte a un intervalo de tiempo al multiplicarlo por el paso de tiempo con el que se ha grabado la señal. Para obtener la velocidad, se divide la distancia espacial entre ambas tomas por el tiempo para el cual se obtiene la correlación máxima, tal y como se hecho anteriormente con los mapas de \hat{R} . En la Figura 23 se muestra el resultado de este algoritmo extendido a diferentes posiciones en la película final. Se puede comprobar que no es necesario tener tantas muestras ya que la velocidad obtenida con cada uno de ellos es muy similar.

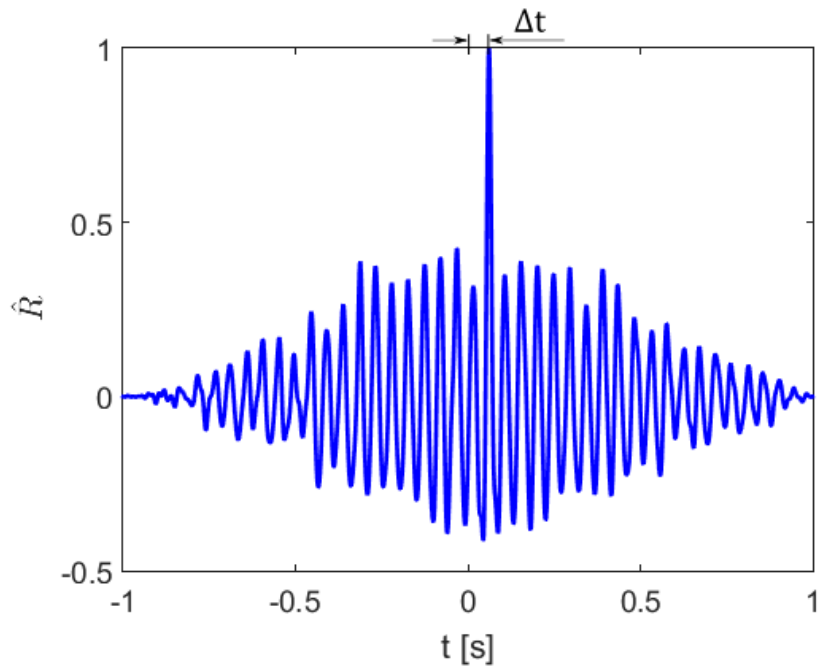


Figura 22: Evolución del operador \hat{R} para la correlación cruzada entre las señales de espesor a $x=0.02$ y $x=0.04$ m.

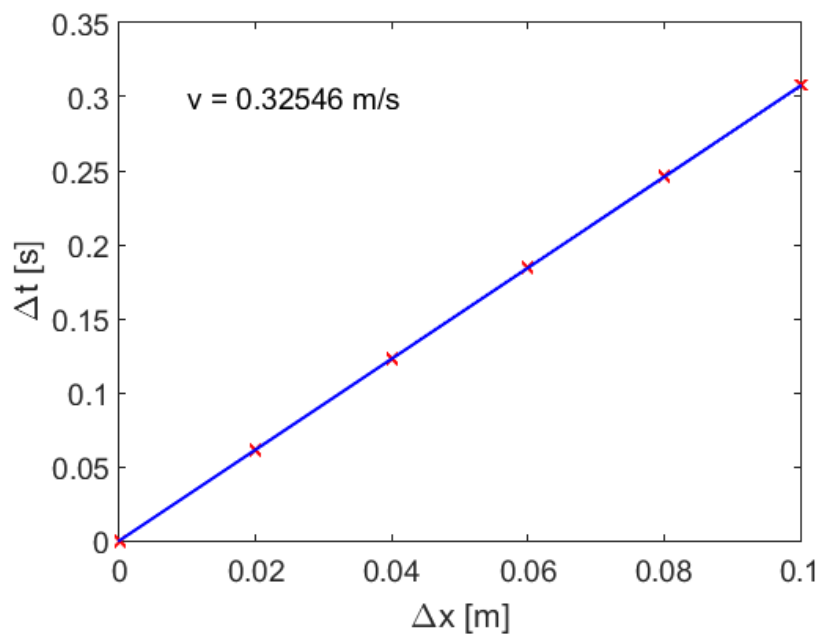


Figura 23: Evolución del punto de correlación máxima en función de la distancia a $x=0.02$ m del que se puede obtener la velocidad de las ondas en la película final

El cálculo de la amplitud de las oscilaciones se lleva a cabo utilizando la señal filtrada de espesores para la posición más lejana al punto de impacto. La detección de los máximos y mínimos locales de la señal se realiza con la función *findpeaks*, que también ofrece la posibilidad de especificar un umbral espacial en el cual descarta los puntos que detecte. Este umbral se establece en función de la frecuencia localizada en las ondas de forma que no sea tan alto que pierda información ni sea tan bajo que detecte puntos que no debería. Incluso con este umbral se siguen detectando puntos que no son máximos ni mínimos. La amplitud de las oscilaciones se calcula como $A_f = \bar{h}_{f_{max}} - \bar{h}_{f_{min}}$. Es necesario llevar a cabo un trabajo

de mejora para el procesamiento de la amplitud, tanto en la detección de los máximos y mínimos como en la forma de calcularla, si bien se considera suficiente en este trabajo fin de máster para poder analizar el comportamiento para los distintos regímenes de funcionamiento. En la Figura 24 se muestra un ejemplo del funcionamiento del algoritmo de obtención de la amplitud, señalando el valor promedio del espesor con una línea roja continua junto con una representación de la amplitud calculada y representada en base al valor medio marcado con líneas rojas discontinuas. Los puntos máximos y mínimos se destacan por medio de círculos de color rojo.

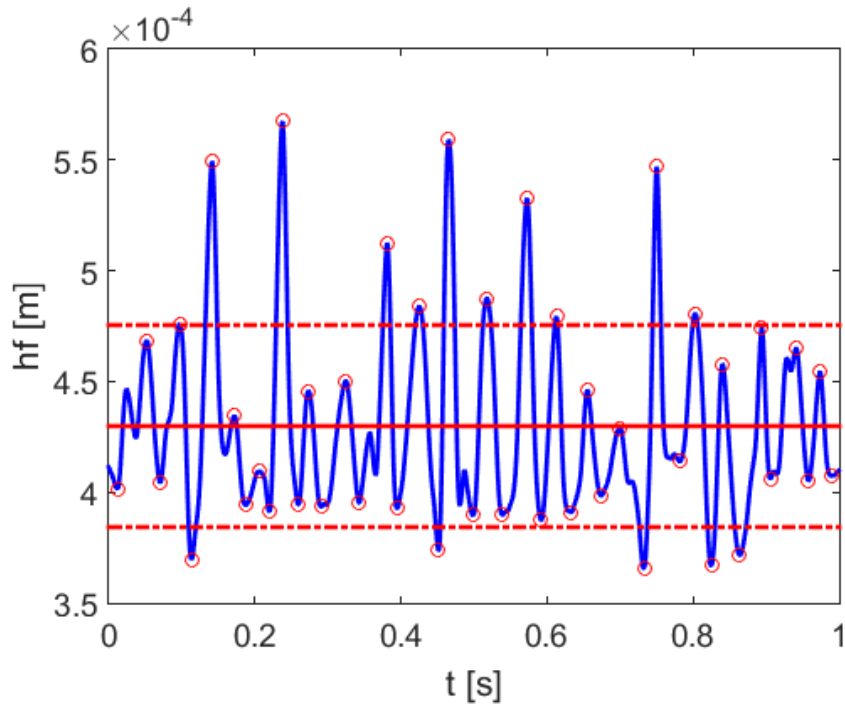


Figura 24: Ejemplo de detección de máximos y mínimos sobre la señal de espesor.

5 RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados en los que se ha basado este trabajo fin de máster. En la apartado 5.1 se realiza un breve resumen acerca de la metodología llevada a cabo en los estudios experimentales. Posteriormente, se muestran los resultados numéricos aquí obtenidos. El apartado 5.2 recoge los resultados de las simulaciones de alta fidelidad de forma separada para el gas y para el líquido. Por último, las pruebas realizadas mediante el modelo integral de película líquida basada en la teoría de la lubricación se encuentran en el apartado 5.3, si bien todavía no se ha llegado a obtener resultados satisfactorios debido a inestabilidades generadas en la zona del runback.

5.1 Datos experimentales para la validación

En este apartado se resume la información más importante acerca de la metodología experimental utilizada en [12], [13]. En la Figura 25 se muestra un esquema representativo del equipo de ensayo utilizado para el estudio y situado en los laboratorios del von Karman Institute en Bruselas (Bélgica). Este montaje modeliza de forma simplificada el proceso de escurrido neumático en las líneas de galvanizado y permite obtener información tanto del comportamiento del gas como de la película por medio de las metodologías de toma de datos que se explicarán más adelante en este mismo apartado. La diferencia fundamental con una línea real de galvanización es que el sustrato que arrastra el líquido es en este caso un cilindro de 450 mm de diámetro y 350 mm de ancho. El sustrato se mueve por medio de un motor eléctrico que tiene un rango de funcionamiento de entre 5 y 20 rpm, lo que equivale a velocidades del sustrato de entre 0,1 y 0,45 m/s. Se utiliza aire para el escurrido mientras que el líquido es dipropilenglicol. El inyector está montado en un soporte de dos ejes, lo que permite modificar su posición para probar distintas situaciones de funcionamiento. Los experimentos se han llevado a cabo para unas distancias de escurrido de $\hat{Z} = 14.2, 17.3, 19.4 \pm 1\%$ y 7 ΔP_n diferentes, resultando un total de 28 combinaciones diferentes.

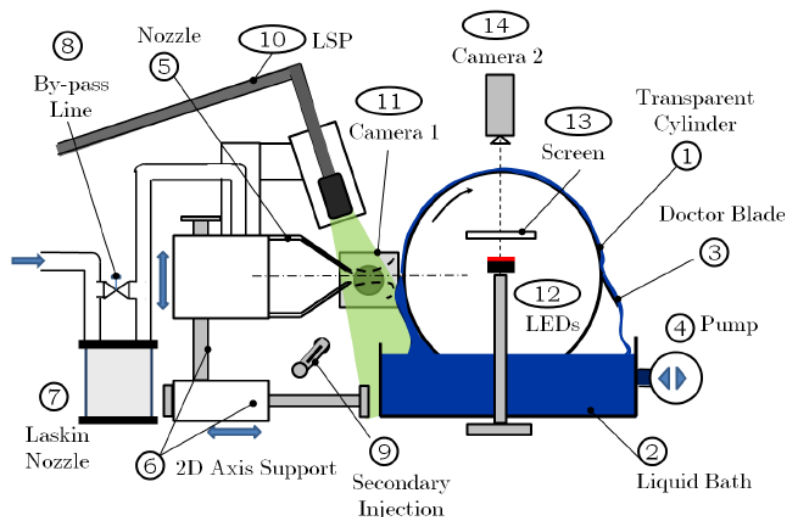


Figura 25: Esquema del equipo de ensayo de escurrido neumático. [13]

Para la toma de datos se utiliza por un lado un Time Resolved Particle Image Velocimetry (TR-PIV) para analizar el flujo de gas y un método de Light Absorption (LA) para el estudio de las ondulaciones en la película líquida. Volviendo a la Figura 25, el TR-PIV se realiza en

la zona cercana al impacto del gas con la película, mientras que el sistema de seguimiento del espesor de la película se sitúa aguas abajo en la parte superior del cilindro. A continuación se resumen brevemente los fundamentos y particularidades de las dos metodologías que acaban de ser introducidas.

La metodología TR-PIV es un método no intrusivo utilizado para la visualización de flujos en fluidos. Consiste en inyectar unas partículas de un material reflectante en el chorro de tal forma que es sencillo detectarlas cuando son iluminadas por medio de la lámina de láser. Para obtener los vectores de velocidad, se han de tomar pares de imágenes en intervalos de tiempo muy cortos para luego correlacionar las posiciones de las partículas y así determinar los vectores velocidad. Estos se obtienen inmediatamente al saber la diferencia de tiempos entre imágenes y el espacio que ha recorrido en dicho tiempo.

Para relacionar la posición de las partículas en dos instantes de tiempo se hace uso de un algoritmo de correlación que no requiere buscar la posición de cada partícula individual, sino que lo que se determina es el desplazamiento medio de grupos de partículas en pequeñas regiones llamadas ventanas de interrogación. Esto se realiza de forma secuencial para todas las ventanas que conforman el área de interrogación. Dichas ventanas suelen ser cuadradas y forman una especie de malla uniforme. El algoritmo de correlación puede ser de dos tipos: la auto-correlación utiliza una sola imagen con dos pulsos de láser, mientras que la correlación cruzada, utilizada en este experimento, se lleva a cabo con dos imágenes iluminadas por un mismo pulso de láser. Para cada experimento se toma un vídeo con $n_t = 21000$ imágenes (10500 pares de imágenes) con una resolución de 512×512 pixels a una frecuencia de 3 kHz. En la Figura 26 se puede ver un ejemplo de un frame tomado de los experimentos.

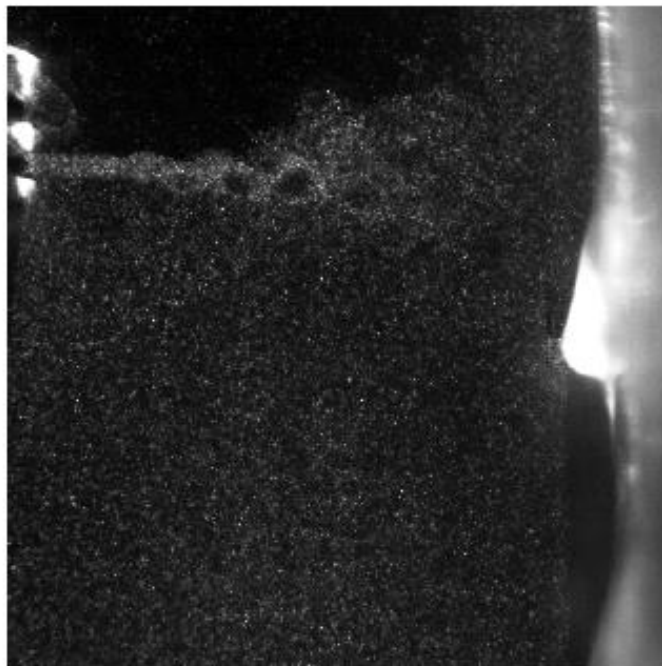


Figura 26: Imagen obtenida en la realización del TR-PIV en la zona de impacto. [13]

El Light Absorption method es una metodología que se basa en la propiedad del líquido por la cual la cantidad de luz absorbida por la película es función del espesor de la misma. Así, se puede determinar la distribución instantánea de espesores de la película $h(x, z, t)$ según una función que ha de ser calibrada de la luz que recibe una cámara de una fuente de luz que se sitúa en el interior del cilindro, tal y como se ve en la Figura 25.

Primero, se realiza una medición de referencia con el substrato seco para obtener $I_0(x, z)$, y posteriormente se realizan las mediciones de intensidad recibida con la película $I(x, z, t)$ para obtener la distribución de espesores por medio de la ley de Beer-Lambert.

$$h(x, z, t) = \frac{1}{\gamma_g} \ln \left(\frac{I_0(x, z)}{I(x, z, t)} \right) = \frac{A(x, z, t)}{\gamma_g}$$

donde A es una variable adimensional que se conoce como absorbancia y γ_g es una constante que representa el coeficiente de extinción de luz. Las calibraciones y el tratamiento de las señales están fuera de los objetivos de este trabajo, pero el lector puede encontrar toda la información en [25]. A continuación, en la Figura 27 se muestra la reconstrucción del campo de espesores en la película final para un caso de estudio en la que se aprecian claramente las ondulaciones.

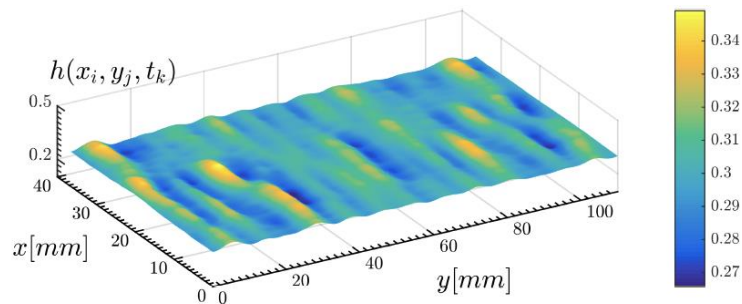


Figura 27: Reconstrucción experimental del campo de espesores mediante la metodología Light Absorption (LA) para el caso en el que $\hat{Z} = 14,2$ y $\Delta P_N = 875 Pa$. [13]

5.2 Simulaciones 3D VOF LES

Estos cálculos son capaces de representar de forma bastante fidedigna la física subyacente en el proceso de escurrido a cambio de un coste computacional elevado, tal y como ya ha sido probado en [26]. Esto limita su utilización únicamente para el ámbito investigador con el fin de estudiar el origen de los problemas encontrados en las líneas de galvanizado. La validación de los resultados numéricos se hace por medio de una comparativa directa con los obtenidos experimentalmente en [12], [13].

Debido a la cantidad de horas de cálculo necesarias para cada caso, nos limitaremos a estudiar los casos para los cuales se ha conseguido tener un tiempo de simulación suficiente para que los resultados sean estadísticamente válidos. Es por ello que los resultados que aquí se presentan se limitan a todas las condiciones de la Tabla 1 para la variante asimétrica del inyector, y el caso de $\hat{Z} = 14,2$ y $\Delta P_N = 425 Pa$ para la variante simétrica con el fin de estudiar la influencia de cambios en la geometría del inyector en el comportamiento del gas.

En la Figura 28 se puede ver una muestra de los resultados obtenidos para el caso base ($\hat{Z} = 14,2$; $\Delta P_N = 425 Pa$) tanto para la fase gas como para el líquido. Tal y como ocurre en la realidad, el chorro de gas impacta contra la película y se divide en dos, provocando una recirculación en la zona superior y otra en la zona inferior que serán objeto de estudio detallado posteriormente. En cuanto al líquido, se ve cómo se generan dos flujos muy diferentes debido a la acción del chorro: desde el punto de impacto hacia abajo se genera el runback con el exceso de líquido retirado de vuelta al baño, mientras que hacia arriba se establece la película final con un espesor mucho más reducido. En ambas regiones se pueden apreciar las ondulaciones del líquido.

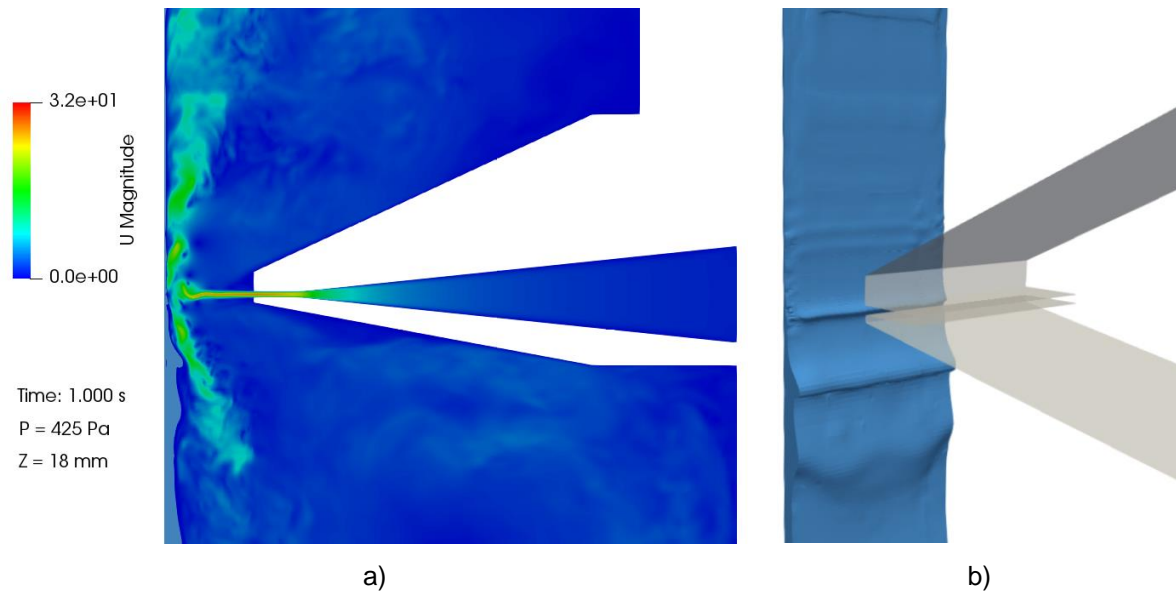


Figura 28: Vista 2D del campo de velocidades en el gas (a) y reconstrucción 3D del líquido (b) con $Z=18$ mm y $P=425$ Pa para la variante asimétrica del inyector.

Cualitativamente es fácil hacerse una idea de lo que está pasando, pero es necesario llevar a cabo un estudio cuantitativo acerca del comportamiento de ambas fases que permita comparar rigurosamente los resultados aquí obtenidos con los de los experimentos. Para ello, en los apartados posteriores se lleva a cabo un análisis aislado de la fase gas y la fase líquida. Además, se limita el estudio a un plano vertical en el medio del dominio para limitar la cantidad de datos a manejar y operar de igual forma que experimentalmente. Los resultados que se muestran a continuación se obtienen por medio de códigos propios elaborados en el entorno Octave y sobre los cuales se puede consultar información detallada en el apartado 4.2.3.

5.2.1 Caracterización del comportamiento del chorro de gas

La comparativa en cuanto al comportamiento del gas se reduce a la obtención del campo de velocidades promediado tal y como se ha realizado experimentalmente por medio de la metodología TR-PIV (Time Resolved – Particle Image Velocimetry). La Figura 29 y Figura 30 muestran cómo la simulación numérica es capaz de obtener los mismos patrones de comportamiento en el gas atendiendo a las dos recirculaciones comentadas anteriormente. Es importante destacar que el algoritmo PIV parece estar fallando en la región del runback, ya que las velocidades obtenidas son anormalmente altas e incluso superiores a las recuperadas en la región previa al impacto, lo cual no es posible por razones obvias. En el caso numérico, las velocidades en la zona de salida del inyector parecen algo superiores, probablemente debido a que las oscilaciones observadas en el chorro de gas sean mayores como parecen indicar las líneas de corriente. Para el resto del dominio, la magnitud de la velocidad es muy similar. En ambos casos, el punto de remanso está ligeramente por debajo del centro del inyector, lo cual está relacionado con algunas teorías acerca de la formación de las ondulaciones y que se desarrollarán más adelante.

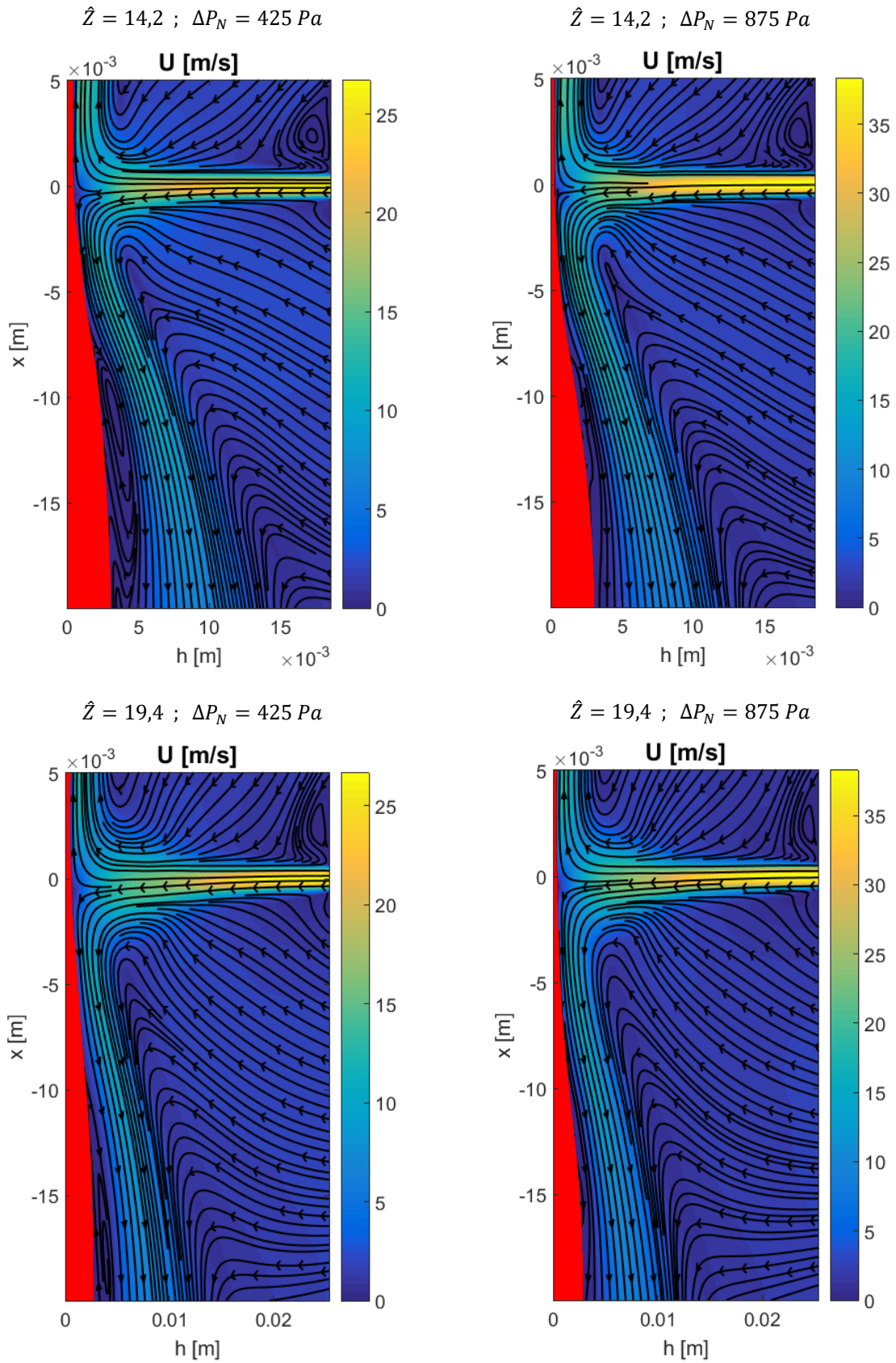


Figura 29: Comparativa entre los campos de velocidad promediados para el estudio numérico.

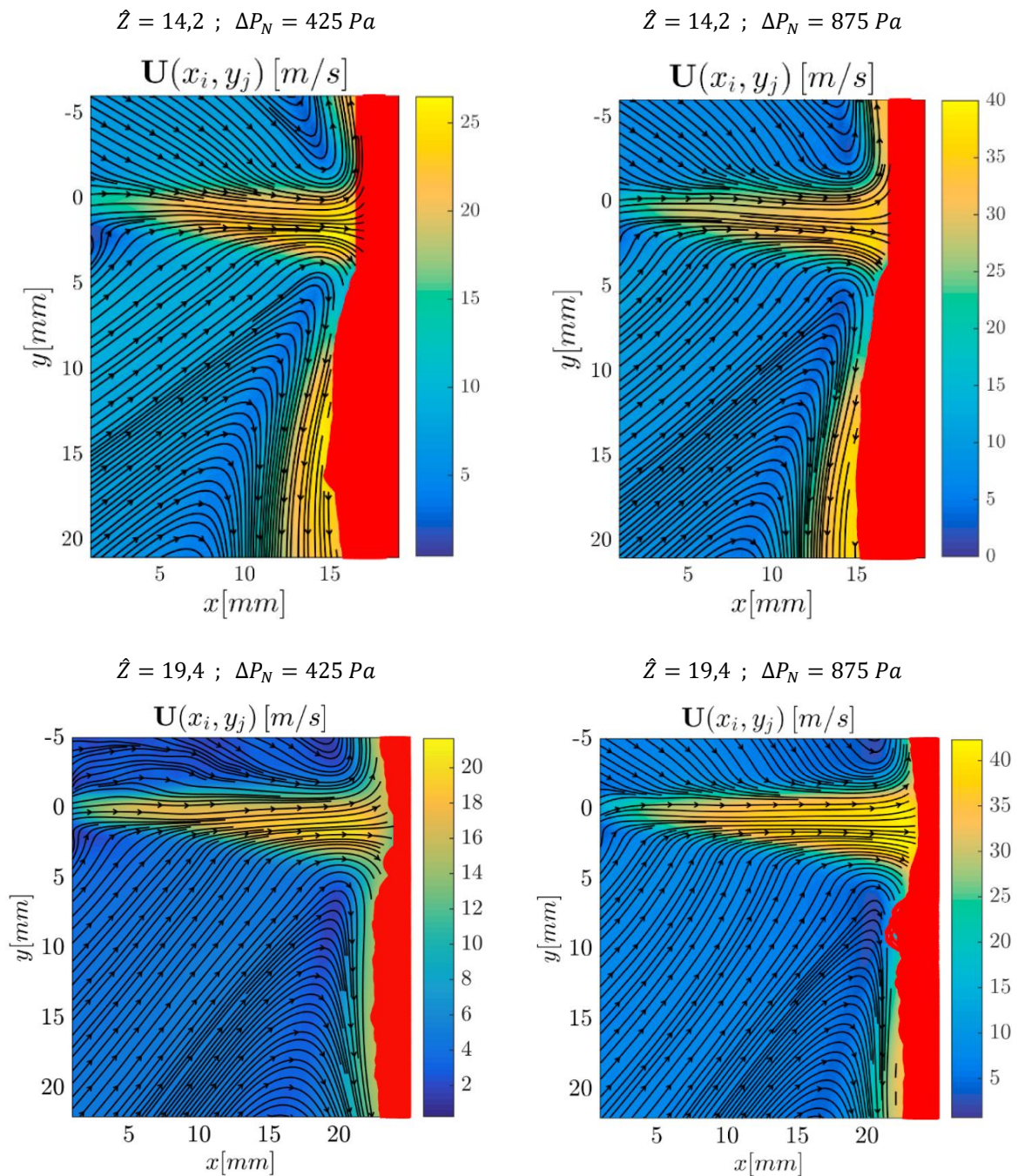


Figura 30: Comparativa entre los campos de velocidad promediados para el estudio experimental. [13]

En la evolución temporal se observa un comportamiento similar al visualizado experimentalmente [13], marcado por el confinamiento producido por la formación de grandes olas en el runback que afectan a la estructura de recirculación situada aguas arriba y generando depresiones que hacen que el chorro de gas se doble hacia abajo hasta que la onda se aleja de la zona de influencia. Esto se repite en el tiempo y es conocido como mecanismo de “lock-unlock”, y es determinante en la generación de ondulaciones en la película final.

5.2.2 Caracterización del comportamiento de la fase líquida

La comparativa de los parámetros más importantes de la película líquida nos permite por un lado realizar un estudio más riguroso en cuanto a la validación de los resultados numéricos; y por otro reafirmar las hipótesis más recientes en cuanto a la formación de las ondulaciones. En este capítulo se presentan los resultados obtenidos según lo explicado en el apartado 4.2.3.2.

En primer lugar, en la Tabla 2 se presenta una comparativa entre los valores numéricos y experimentales en cuanto a espesor de la película final promediado. En general, los cálculos subestiman el espesor respecto a los datos experimentales, aunque los errores se encuentran siempre por debajo del 20%. Estos resultados se consideran aceptables dadas las diferencias existentes entre la instalación experimental y el dominio de cálculo, así como la incertidumbre de ambos resultados.

Tabla 2: Comparativa de los espesores para el estudio experimental y numérico.

Z/d	Z [mm]	ΔP_N [Pa]	h_f [μm]		Error [%]
			Experimental	Numérico	
19,4	25,22	425	606,91	513,35	15,4%
19,4	25,22	875	399,41	327,35	18,0%
14,2	18,46	425	449,33	430,73	4,1%
14,2	18,46	875	310,48	264,64	14,8%

En todos los casos se ha comprobado que el espesor medio es estadísticamente correcto, ya que puede haber casos en los que la ventana temporal disponible sea tan reducida que no el promedio no alcanza la convergencia. Además, se utilizan las señales para distintas distancias al punto de impacto de tal forma que se disminuye la influencia de este motivo en el promedio. En la Figura 31 se muestra una señal temporal de espesores junto con el valor del promedio acumulado en el que se ve que rápidamente se alcanza la convergencia.

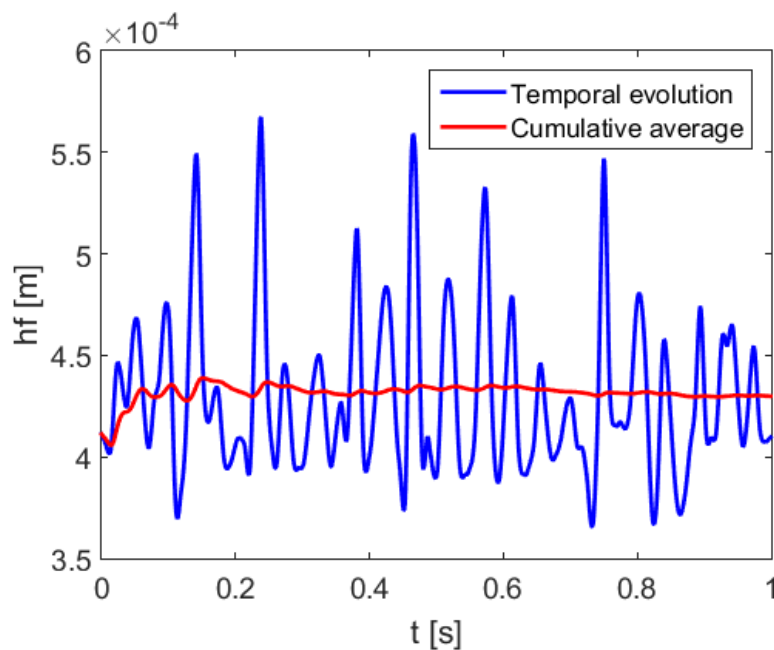


Figura 31: Evolución temporal (azul) y promedio acumulado (rojo) para una señal temporal de espesores.

Naturalmente, la amplitud de las oscilaciones también es un parámetro de gran interés debido a su influencia en la calidad del producto. La obtención del valor medio de la amplitud ha sido uno de los mayores retos en cuanto al procesado de los resultados por las razones anteriormente expuestas. En la Tabla 3 se muestra una comparativa del ratio entre la amplitud media de pico a pico A_f y el espesor de referencia h_0 promediado para cada caso. Los resultados numéricos son del mismo orden de magnitud, aunque no recogen las tendencias capturadas experimentalmente en función de los parámetros de escurrido. Esto puede venir justificado en base a dos razones fundamentales. Por un lado, las mediciones en el estudio experimental se realizan en un punto situado aguas abajo a una distancia del punto de impacto mayor que la distancia máxima posible dadas las dimensiones del dominio de cálculo; a lo que hay que añadir que la toma de datos se sitúa en la parte superior del cilindro rotativo en la metodología experimental con la gravedad actuando de forma perpendicular al substrato, en ambos casos amortiguando la amplitud de las oscilaciones. Por otro lado, no se ha llegado a conocer el procesado experimental de la señal para el cálculo de la amplitud, lo que hace que la comparación no sea todo lo rigurosa que debería.

Tabla 3: Comparativa de las amplitudes para el estudio experimental y numérico.

Z/d	Z [mm]	ΔP_N [Pa]	A_f/h_0 [%]	
			Experimental	Numerical
19,4	25,22	425	2,9	8,6
19,4	25,22	875	4,8	3,5
14,2	18,46	425	2,6	4,9
14,2	18,46	875	4,0	2,4

Según lo explicado en el capítulo anterior, se puede realizar un estudio espacio-temporal del espesor para un rango determinado de x , y llevar esta información a un mapa de colores como los de la Figura 32 en los que se ve claramente la formación periódica de ondulaciones especialmente en el runback debido a que aquí los espesores son mayores. En relación al comportamiento anteriormente comentado del chorro de gas, aquí también se ve como la frontera que divide las dos regiones se sitúa por debajo del eje del inyector, una prueba más de la periódica deflexión del chorro de gas y del acoplamiento entre ambos.

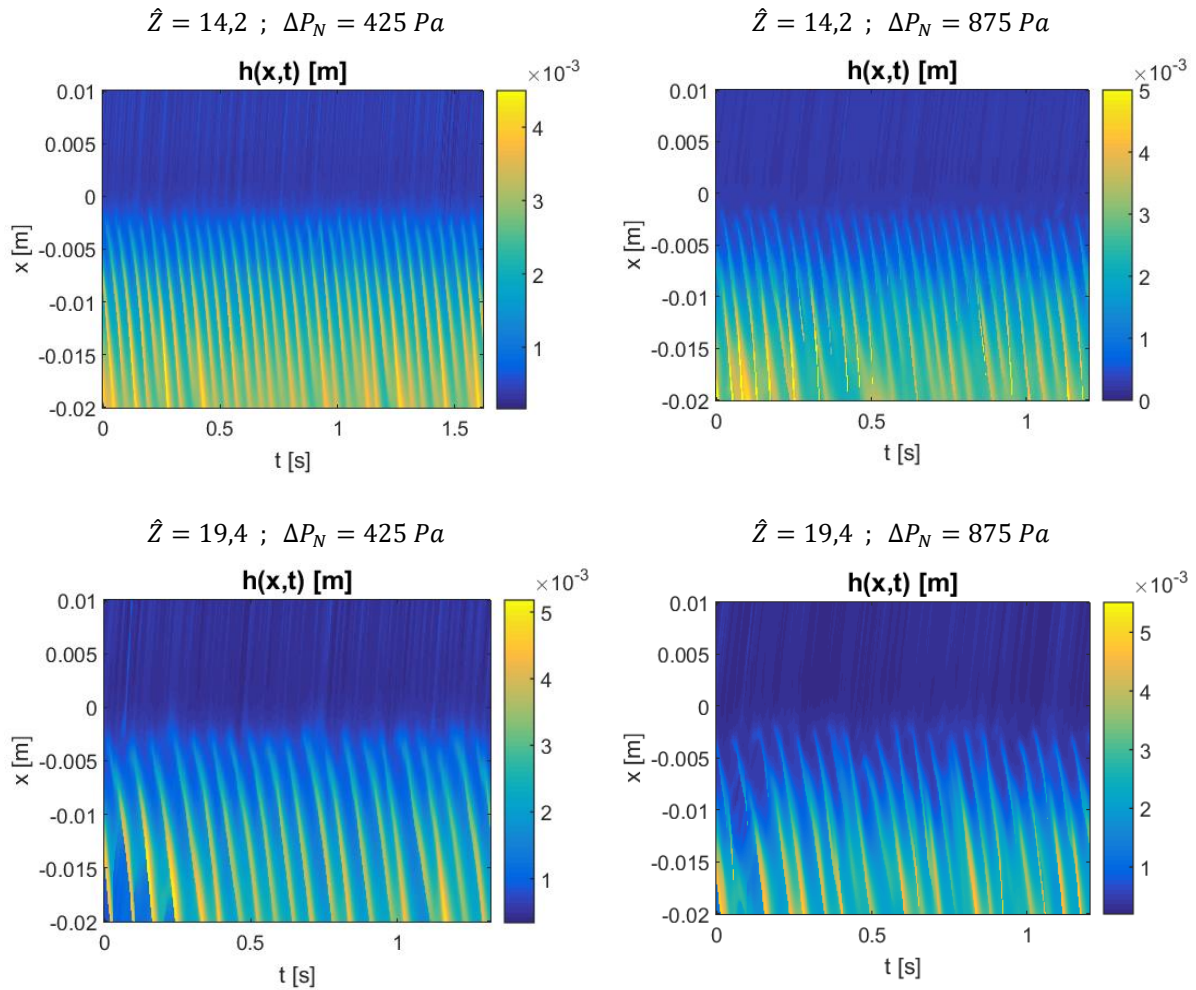


Figura 32: Mapa espacio-temporal de espesores para los diferentes casos de estudio.

A continuación, en la Figura 33 se muestra una colección de los análisis frecuenciales explicados en el capítulo 4.2.3 y obtenidos en base a los mapas espacio-temporales. En general, las frecuencias en el runback están mucho más marcadas, mientras que en la película final no es tan claro debido a la importancia que adquiere el ruido y la precisión de la detección de la superficie libre respecto el espesor, lo cual también es un problema que se aprecia en los resultados experimentales. En esta figura se puede ver cómo por ejemplo para el caso de $\hat{Z} = 14,2$ y $\Delta P_N = 875 Pa$, en el runback las frecuencias más energéticas disminuyen al producirse una combinación aguas arriba entre las olas generadas en el punto de impacto, lo cual es visible también en los mapas de espesores espacio-temporales. Para el mismo caso, también es interesante ver los distintos comportamientos en cuanto a las frecuencias de las ondas transmitidas en el runback y en la película final.

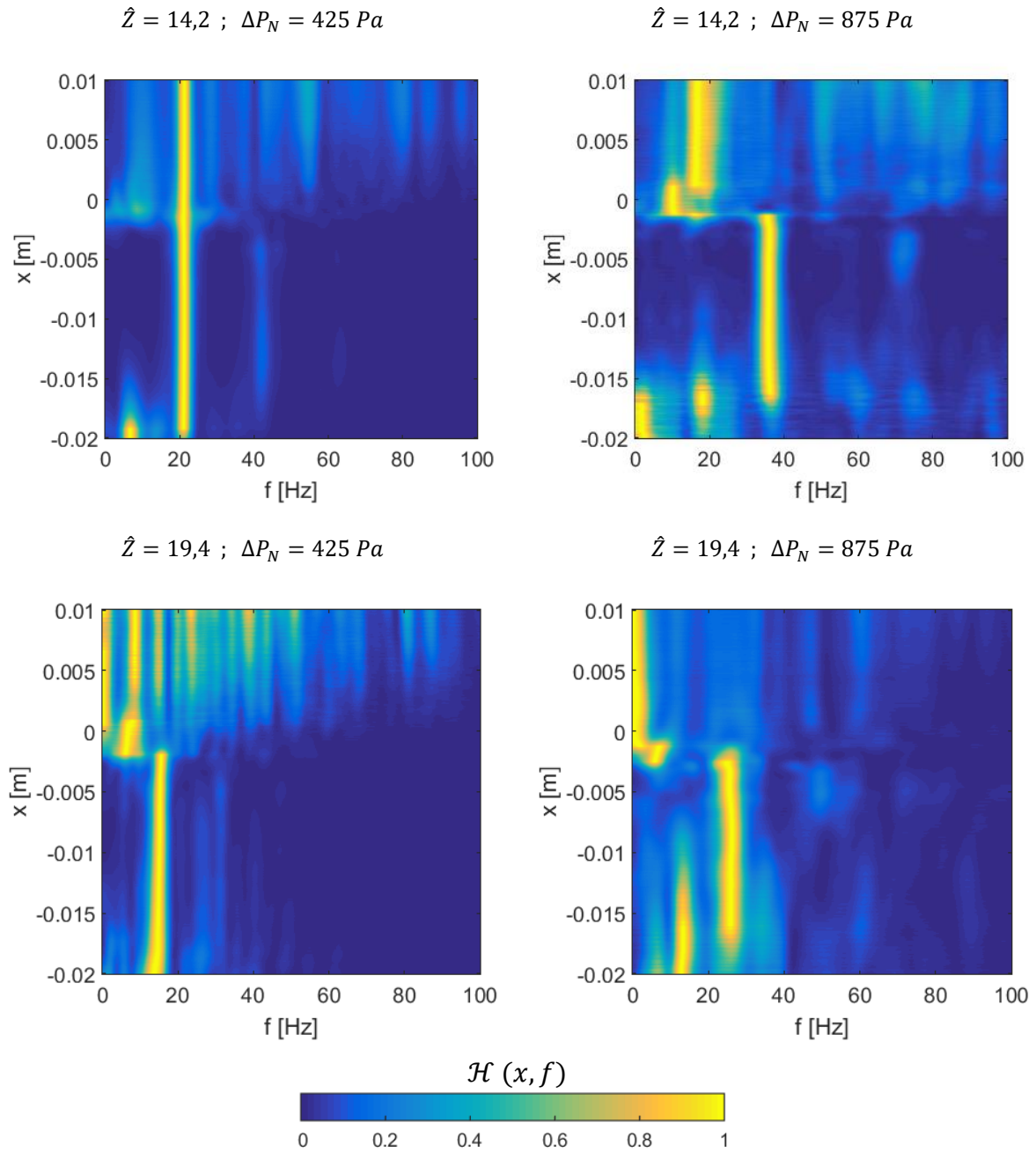


Figura 33: Mapa de densidad espectral de potencias adimensionalizada ($\hat{\mathcal{H}}$) para la evolución temporal del espesor para los diferentes casos de estudio.

Para verlo en más detalle, se analizan dos posiciones específicas: una en el runback y otra en la película final. Los resultados numéricos y experimentales se muestran en la Figura 34 y Figura 35 respectivamente. De nuevo, en la zona de la película final y especialmente para los casos de $\hat{Z} = 19,4$ no se consigue detectar las frecuencias dominantes, mientras que en el runback sí que se obtiene una buena caracterización del espectro para todos los casos.

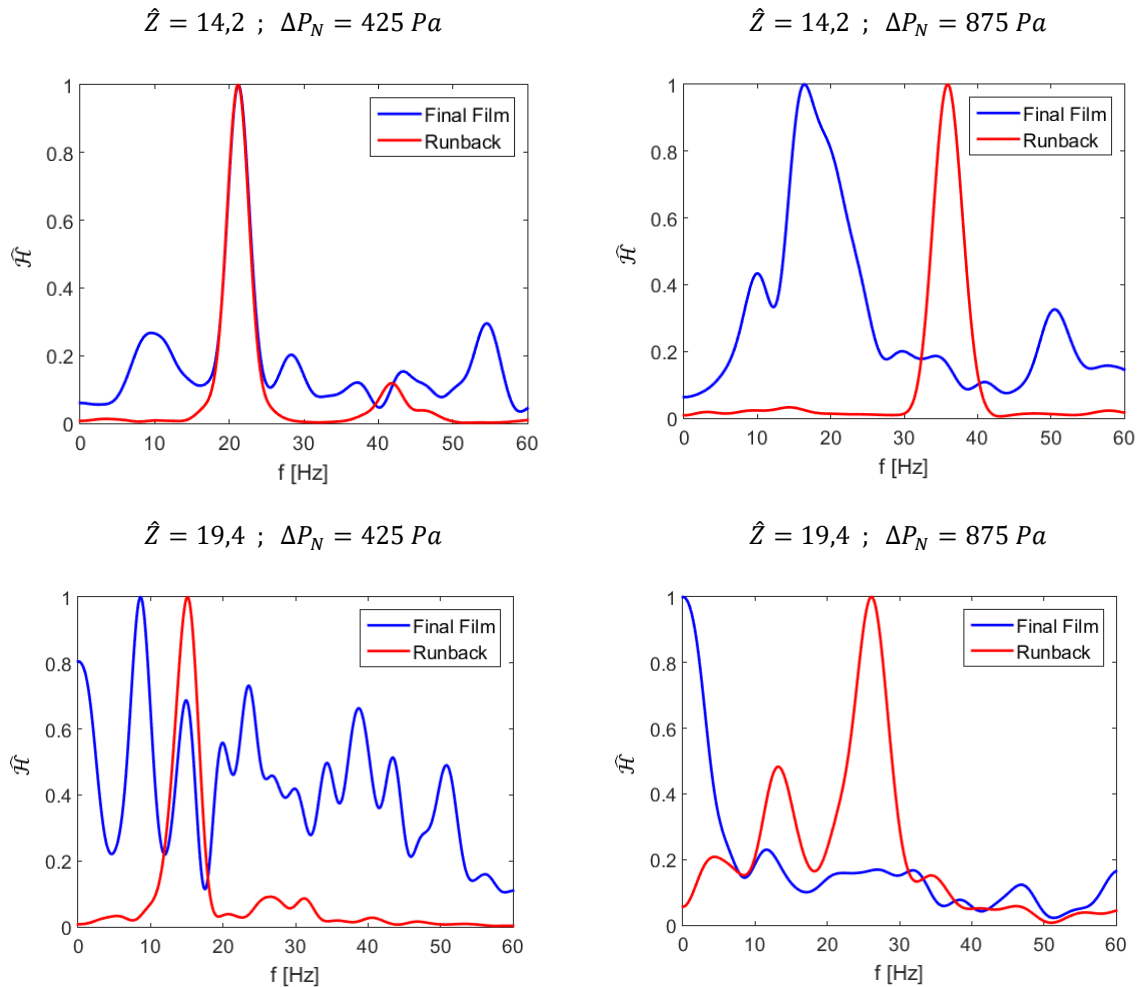


Figura 34: Densidad espectral de potencia adimensionalizada (\hat{f}) para las señales temporales numéricas de espesor en el runback (rojo) y película final (azul).

En general, el acuerdo entre los resultados experimentales y numéricos es bastante bueno en cuanto a las frecuencias más energéticas y al resto de armónicos presentes. Además, se recuperan comportamientos singulares como los del caso de $\hat{Z} = 14,2$ y $\Delta P_N = 875 Pa$ caracterizado por obtener unas frecuencias principales en la película muy diferentes a las encontradas en el runback.

También se ha analizado la velocidad de las ondas en ambas regiones por medio de algoritmos de correlación cruzada detallados en el apartado 4.2.3.2. En la película final se ha obtenido una velocidad de 0,37 m/s en las zonas más cercanas al punto de impacto, algo mayores que la velocidad del substrato ($U_s = 0,34 m/s$) debido a la influencia del chorro, que se ven disminuidas al alejarse del mismo hasta unos 0,325 m/s. En el runback, la velocidad obtenida es de unos 0,259 m/s. Ambos valores encajan con los obtenidos en estudios numéricos para condiciones similares, en los que se ha obtenido una velocidad de 0,376 m/s para la película final y 0.279 m/s para el runback [25].

Por último, se pretende realizar una estimación de la longitud de onda de las ondulaciones en base a los valores obtenidos de la velocidad y frecuencia de las ondas ($\lambda = U/f$). Aquí nos limitamos a analizar el caso en que $\hat{Z} = 14,2$ y $\Delta P_N = 425 Pa$ para el que el espectro de frecuencias muestra claramente como la frecuencia principal está alrededor de 21 Hz. En base a lo explicado anteriormente, la longitud de onda que se obtiene es de $\lambda = 15,5 mm$, lo que representa de forma más clara las ondulaciones en vez de la frecuencia.

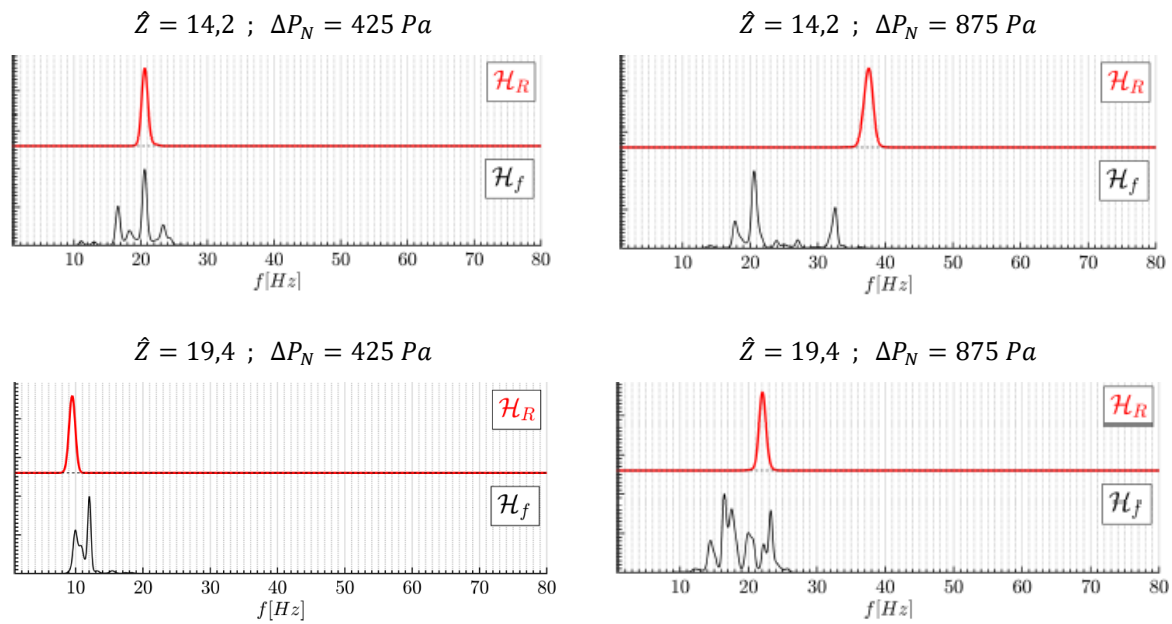


Figura 35: Densidad espectral de potencia ($\hat{\mathcal{H}}$) para las señales temporales experimentales de espesor en el runback (rojo) y película final (negro). [13]

5.2.3 Influencia de la geometría del inyector

El confinamiento periódico del gas por parte de las ondas del runback ya se ha presentado como uno de los mecanismos de formación de ondulaciones en la película final. El objetivo de este apartado es tratar de comprobar la importancia de la geometría del inyector en el confinamiento del flujo de gas. Para ello, aquí se van a comparar los resultados para las variables simétrica y asimétrica de la Figura 8 para el caso de $\hat{Z} = 14,2$ y $\Delta P_N = 425 Pa$. La configuración de los casos es exactamente igual en cuanto a condiciones de contorno e iniciales, propiedades de los fluidos, etc. La comparativa se limita únicamente a comparar resultados cualitativos ya que las diferencias entre los resultados cuantitativos pueden venir dadas por elementos ajenos a la geometría.

En primer lugar, en la Figura 36 se comparan los campos promediados de velocidad, en los que se puede apreciar como hay un aumento de la deflexión del chorro de gas hacia abajo respecto de la variable asimétrica. Esto es resultado del aumento del confinamiento producido por la nueva posición de la pared externa de la parte inferior del inyector, que afecta a la recirculación producida en la parte inferior del dominio. Otros aspectos a destacar en esta prueba son la simetría de las recirculaciones generadas a la salida del chorro y una mayor amplitud de las oscilaciones dada la mayor difusión de los valores de la magnitud de la velocidad en la zona central.

En cuanto al estudio del líquido, se puede observar en la Figura 37 cómo con la variante simétrica el comportamiento es mucho más desordenado. En la zona del runback ahora la fusión de las ondas es más claro y frecuente. Por otro lado, aquí se vuelve a ver cómo la zona que separa las dos regiones -que viene siendo la zona de impacto- está ligeramente desplazada hacia abajo. En el mapa de la variante simétrica se destaca la formación de unas ondas de gran amplitud en la película marcadas por iniciarse en una región del espacio en la que normalmente se desarrolla el runback, arrastrando parte del mismo aguas abajo hacia la película final, por lo que también el runback disminuye su espesor típico.

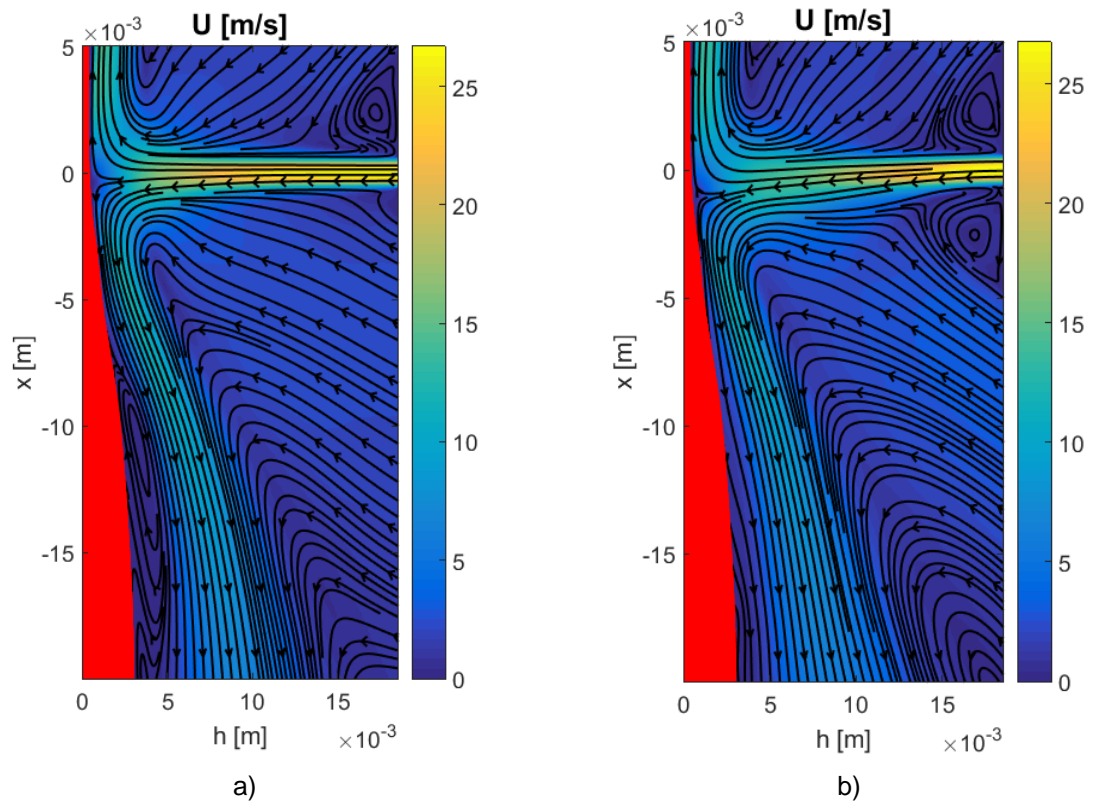


Figura 36: Comparativa del campo de velocidades promediado para la variante asimétrica (a) y simétrica (b) para $\hat{Z} = 14,2$ y $\Delta P_N = 425 Pa$.

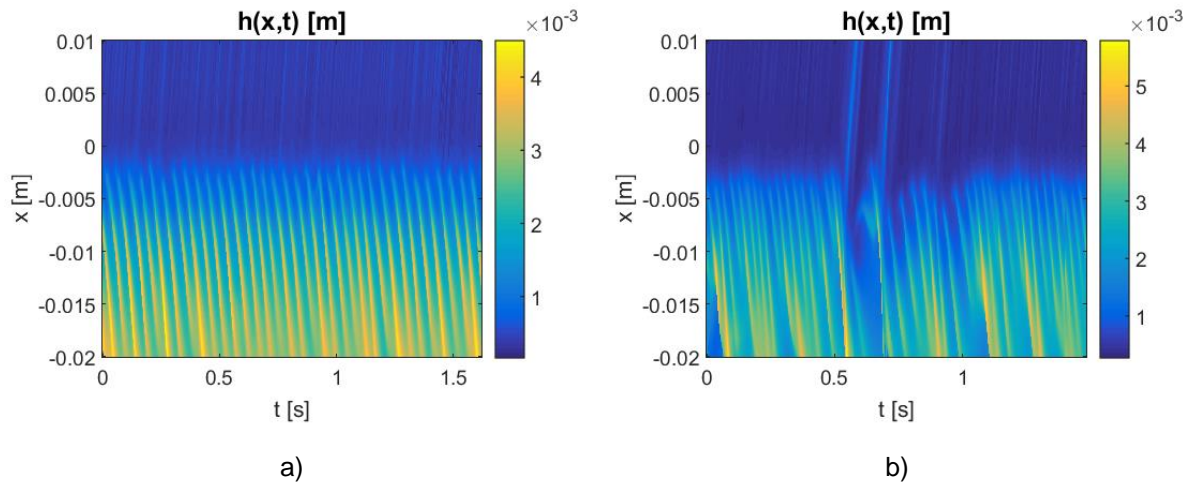


Figura 37: Mapa espacio-temporal de espesores para la variante asimétrica (a) y simétrica (b) para $\hat{Z} = 14,2$ y $\Delta P_N = 425 Pa$.

5.3 Simulaciones mediante modelo integral

Las simulaciones anteriores han probado ser muy valiosas en cuanto a la fidelidad con la que representa las características principales de los experimentos. Como contrapartida, el enorme coste computacional hace que sea inviable para fines industriales y genera la necesidad de buscar alternativas menos costosas capaces de predecir las ondulaciones.

Inicialmente, en el apartado 5.3.1 se muestran una serie de pruebas que comparan resultados numéricos de simulaciones 3D VOF LES con las correlaciones propuestas que ponen en entredicho la validez de la hipótesis ampliamente aceptada en la bibliografía de que el comportamiento del chorro de gas no se ve afectado por la presencia de la película líquida. Posteriormente, en el apartado 5.3.2, se recoge una serie de pruebas realizadas con el modelo integral que suponen un punto de partida sobre el cual queda todavía mucho por analizar debido a los problemas que se han encontrado. Las propiedades del líquido se mantienen iguales a las de los experimentos y simulaciones anteriores.

5.3.1 Consideraciones acerca de los actuadores de escurrido

Como ya se ha comentado anteriormente, los modelos teóricos resumen el comportamiento del gas sobre el líquido a dos factores conocidos como actuadores de escurrido. Estos son la distribución sobre la película del gradiente de presiones y de esfuerzo cortante. Es importante señalar de nuevo que aquí no hay acoplamiento entre fases, lo que significa que los cambios que se produzcan en la fase líquida no afectarán al gas, lo cual no es cierto en la realidad pero que simplifica en gran medida las ecuaciones, a la vez que disminuye varios órdenes de magnitud el coste computacional. Dada la importancia de estos factores, en este trabajo se ha tratado de investigar su influencia así como comprobar la validez de hipótesis que han sido supuestas en multitud de estudios previos.

Por un lado, se ha considerado modelar el papel del gas únicamente por medio de la distribución de gradiente de presiones, dejando a un lado el esfuerzo cortante ya que además no es sencillo de obtener de las simulaciones bifásicas. Esto permite una configuración más rápida de los casos de prueba además de limitar las complicaciones en cuanto a modificaciones en el código del solver original al tener que introducir una variable menos. Es obvio que esta modificación ha de ser cuantificada y es por ello que hemos cogido un caso de prueba que nos permita analizar la influencia del esfuerzo cortante sobre el perfil de espesores. Para ello, se ha decidido utilizar el modelo 1D ya que en las simulaciones 3D VOF LES no hay forma de abstraer la contribución de esfuerzo cortante, además de necesitar tiempos de cálculo extremadamente elevados que no se justifican para lo aquí requerido.

En la Figura 38 se muestra el perfil de espesores obtenido en ambos casos: con la distribución de esfuerzo cortante en base a las correlaciones propuestas y con una distribución de esfuerzo cortante nula. Cualitativamente, solo se comprueba cómo varía la forma en la región de transición entre la película final y el runback. Cuantitativamente, los resultados con el modelo 1D revelan que el esfuerzo cortante tiene una influencia de un 3% en términos de espesor final y un 0,6% en el runback.

Con esto, se prueba que el trabajo de escurrido realizado por el esfuerzo cortante en las condiciones descritas es despreciable, siendo principalmente el gradiente de presiones el responsable de realizar el escurrido. Es por ello que para el modelo integral únicamente se considera la distribución de presiones, si bien en un futuro se plantea la introducción del esfuerzo cortante debido a que en las condiciones reales de escurrido para una aplicación industrial este término adquiere mayor importancia.

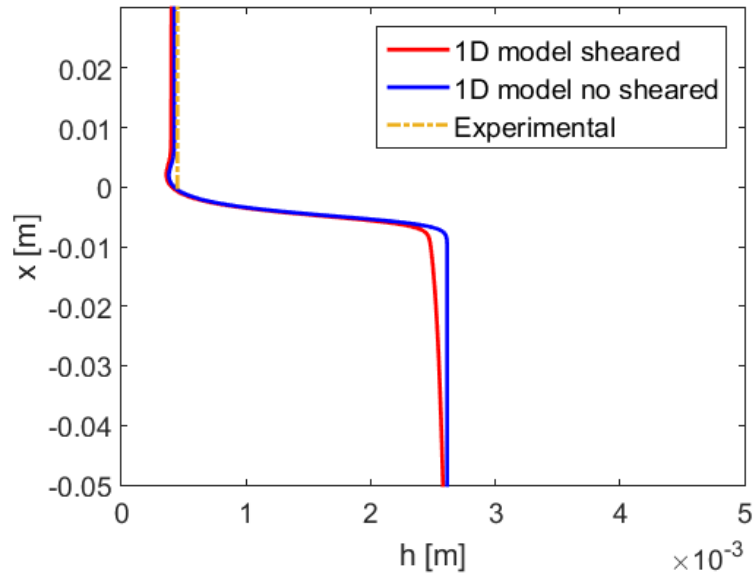


Figura 38: Comparativa de los perfiles de espesores obtenidos con el modelo 1D con la distribución de esfuerzo cortante obtenida mediante las correlaciones propuestas (línea roja) y sin esfuerzo cortante (azul) con $Z=18$ mm y $\Delta P_N=425$ Pa.

También se ha analizado la forma en la que la presión y por tanto el gradiente de presiones se transmite a través de la película. Tal y como se puede ver en la Figura 39, en la que se compara el perfil de presiones promediado en el tiempo para la zona cercana al punto de impacto tanto en las celdas pegadas a la pared como en la interfaz entre ambas fases, la presión se mantiene aproximadamente constante a través del espesor. Esto es importante desde un punto de vista operativo en los cálculos o experimentos debido a que la medición de estas propiedades se complica mucho cuando se realiza en la interfaz, ya que implica llevar a cabo una detección de la interfaz que introduce ruido debido al salto de propiedades entre las fases.

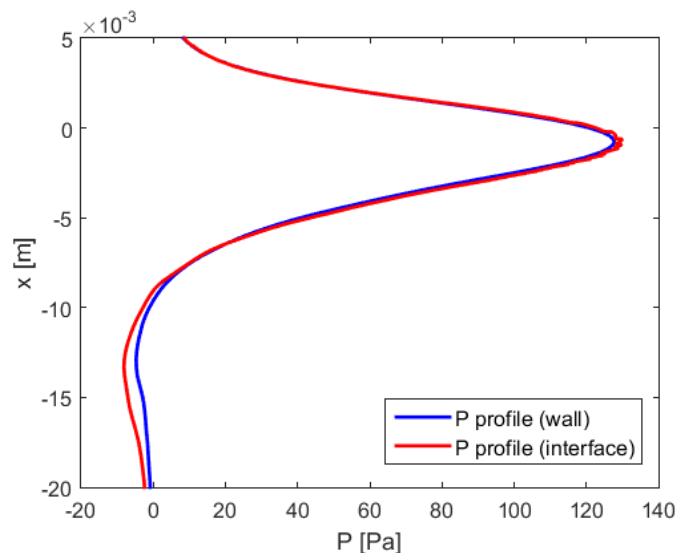


Figura 39: Comparativa entre los perfiles de presión promediados en la pared (azul) y en la interfaz (rojo) con $Z=18$ mm y $\Delta P_N=425$ Pa.

Una vez probado esto, el siguiente paso es comprobar cómo se ajustan las correlaciones teóricas recogidas anteriormente respecto a los perfiles con y sin película. Para ello, se ha realizado una simulación 3D VOF LES sin película líquida. Es decir, se considera solo el chorro de gas impactando sobre la placa plana en movimiento. La comparativa de resultados se recoge en la Figura 40, donde se puede ver a la izquierda los resultados sin película y a la derecha los resultados con la película líquida. Con un vistazo rápido a estas gráficas se comprueba como la presencia del líquido tiene una influencia clave en el comportamiento del gas, disminuyendo la presión y su gradiente máximo, así como produciendo una asimetría clara en la parte del runback. Por otro lado, también es importante destacar la capacidad de la simulación sin líquido para obtener distribuciones muy similares en cuanto forma y valores máximos respecto a las correlaciones de la literatura.

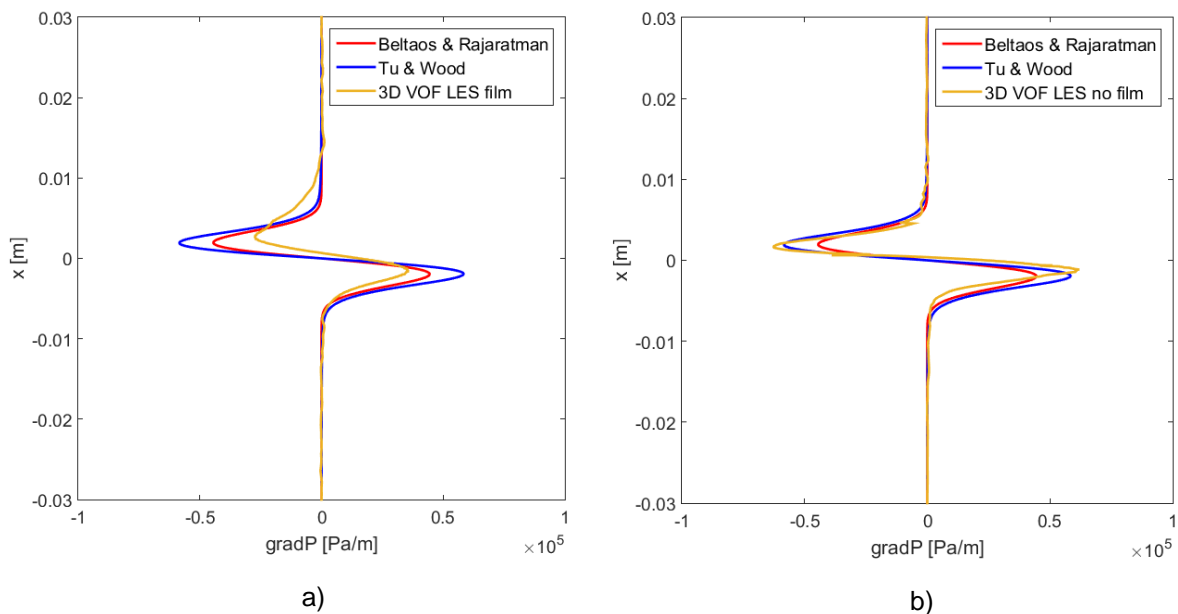


Figura 40: Comparativa entre las correlaciones propuestas y los perfiles obtenidos en la pared con la película líquida (a) y sin la película líquida (b).

Estos resultados ponen en entredicho una de las hipótesis más generalizadas en cuanto a los modelos simplificados de tipo “one-way” que suponen que la presencia de la película no afecta al gas y por ello utilizan las correlaciones sobre placa plana seca, aunque depende mucho de las condiciones a estudiar.

Por otro lado, también la importancia de la oscilación del punto de impacto necesita ser analizada en detalle ya que puede suponer una gran limitación para este tipo de aproximaciones a la hora de obtener las ondulaciones de la película final. En este sentido, es sencillo comprender que los campos promediados para el caso con la película los valores máximos sean más reducidos debido a que el punto máximo varía en el espacio y por tanto el valor medio puede dejar de ser representativo.

5.3.2 Resultados

En este apartado se recogen las pruebas realizadas con el modelo de película líquida modificado para introducir la distribución del campo de presión sobre la película. Como ya se ha dicho anteriormente, no se ha conseguido hacer funcionar el modelo de forma estable por lo que con estas pruebas lo que se pretende es tratar de descartar posibles causas de las inestabilidades. Se parte de casos de prueba sencillos para ir escalando en complejidad hasta

casos que buscan modelar el problema de escurrido neumático de forma análoga a lo realizado en las simulaciones multifásicas. La forma de inicializar el cálculo y otros detalles importantes acerca del resto de condiciones de contorno como la velocidad del substrato se especifican en cada uno de los siguientes subapartados.

5.3.2.1 Escurrido neumático sobre placa plana horizontal

El primer caso de prueba consiste en una película líquida en reposo de un espesor de 500 μm sobre una placa plana horizontal que se deja evolucionar bajo el efecto de una distribución de presiones basada en las correlaciones propuestas utilizando los datos del caso de prueba ($\hat{Z} = 14,2$; $\Delta P_N = 425 \text{ Pa}$). En adelante, cuando no se especifique lo contrario, se entenderá que se aplica esta misma distribución.

Para que la evolución de la película sea más suave y así evitar desestabilizar el cálculo, se ha modificado el código para introducir una rampa temporal para el término de presión debido a la acción del chorro de gas. En rojo se muestra la parte añadida al código en *myKinematicSingleLayer.C*, de tal forma que parte de 0 y alcanza el valor final para $t = 1 \text{ s}$.

```
tmp<volScalarField> kinematicSingleLayer::pu()
{
    return tmp<volScalarField>
    (
        new volScalarField
        (
            IObject
            (
                typeName + ":pu",
                time_.timeName(),
                regionMesh(),
                IObject::NO_READ,
                IObject::NO_WRITE
            ),
            pPrimary_ * time.value() // gas jet pressure from correlations
            - pSp_ // accumulated particle impingement
            - fvc::laplacian(sigma_, delta_) // surface tension
        )
    );
}
```

A continuación, en la Figura 41 se superpone el perfil de espesores para el momento inicial y final de la rampa de presión. En este caso, se ve claramente como el gradiente de presiones está modificando la forma del perfil de espesores, y en ningún caso parece haber problemas numéricos más allá de no llegar a recuperar un perfil de espesores simétrico. Esto prueba que estamos introduciendo la distribución de presiones de forma correcta y que el campo de espesores tiene una respuesta física acorde con el campo de presiones.

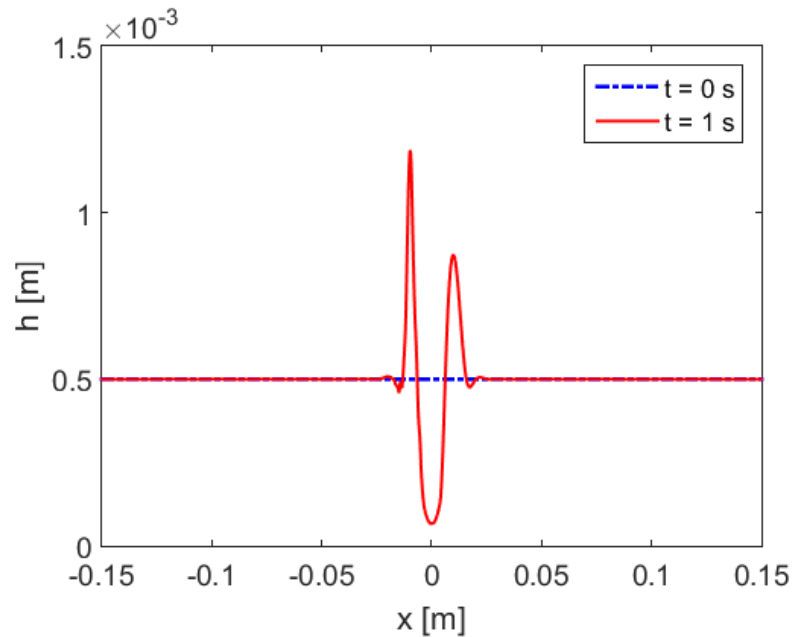


Figura 41: Evolución del perfil de espesores para el momento inicial y final de la rampa de presión sobre placa plana horizontal.

5.3.2.2 Arrastre de líquido en condiciones de flujo crítico y subcrítico

Este tipo de cálculos tratan de simular únicamente el fenómeno de arrastre de líquido por parte del substrato móvil, que esta vez se sitúa en posición vertical con $U_s = 0,34 \text{ m/s}$. La teoría establece un espesor de referencia h_0 que representa el espesor que equilibra las fuerzas de viscosidad con las fuerzas gravitatorias.

$$h_0 = \sqrt{\frac{\mu U_s}{\rho g}} = \sqrt{\frac{0,075 \times 0,34}{1023 \times 9,8}} = 0,00159 \text{ m}$$

Para espesores menores al espesor de referencia, se dice que el flujo es subcrítico y por tanto la viscosidad vence a la gravedad. Esto significa que todo el líquido fluye en el sentido de la velocidad del substrato. Para espesores mayores al espesor de referencia, el flujo se dice que es supercrítico, la gravedad vence a la viscosidad y significa que una parte del flujo no tiene la fuerza suficiente para vencer a la gravedad y por lo tanto tiende a seguir el sentido de la misma. En estas pruebas se simulan los dos tipos de flujos estableciendo un espesor de $h = 0,0005 \text{ m}$ para el régimen subcrítico y $h = 0,0035 \text{ m}$ para el crítico.

En los dos extremos del dominio se establece una condición de gradiente nulo tanto en velocidad como en espesor. Los resultados en cuanto a perfil de espesor para un determinado instante de tiempo se muestran en la Figura 42. Como se puede comprobar, al cabo de cierto tiempo, el cálculo para un régimen subcrítico se encuentra establecido y es equivalente al del tiempo inicial. Por otro lado, para el caso supercrítico se comienzan a ver inestabilidades en el espesor que nacen en la parte inicial y que al cabo de cierto tiempo se transmiten al otro lado del dominio.

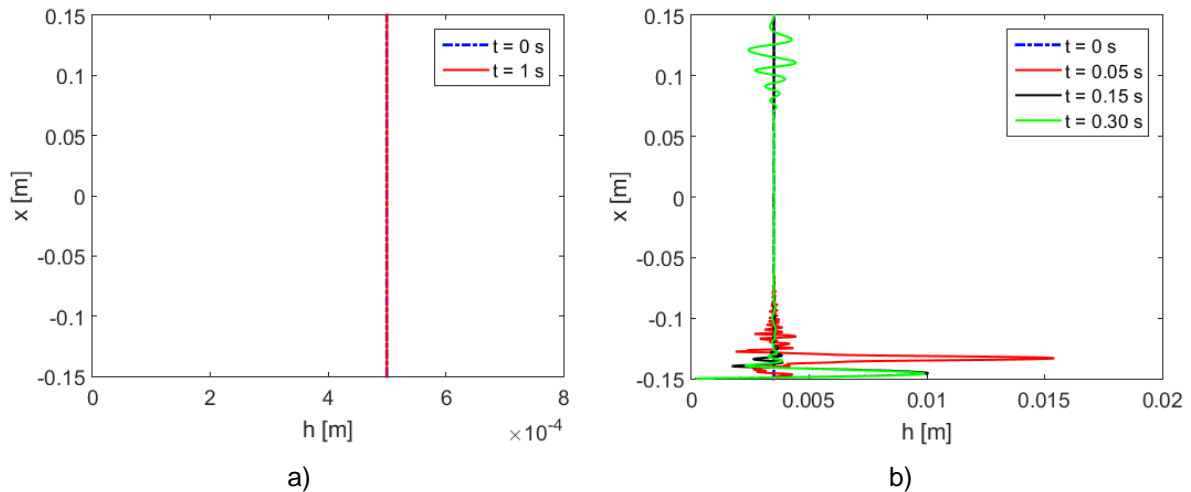


Figura 42: Evolución de la película arrastrada por el substrato para un caso en el que el flujo es subcrítico (a) y supercrítico (b).

5.3.2.3 Escurrido neumático con inicialización de la película fluida

Este último caso aglutina las particularidades de todos los anteriores y trata de ser representativo del problema real de escurrido neumático. Aquí, además de utilizar el substrato vertical en movimiento añadimos la influencia del gas sobre el líquido por medio de las correlaciones para la distribución de presiones. Por otro lado, para ayudar al cálculo a evolucionar hacia la solución y evitar inestabilidades, se inicializa el campo de espesores y velocidades medias en base al modelo 1D. Igual que en todos los casos anteriores, se aplica una condición de gradiente nulo en los extremos del dominio. En la Figura 43 se puede ver la evolución temporal para el mismo, en la que se vuelve a ver igual que en el caso anterior que en la zona del runback se generan inestabilidades.

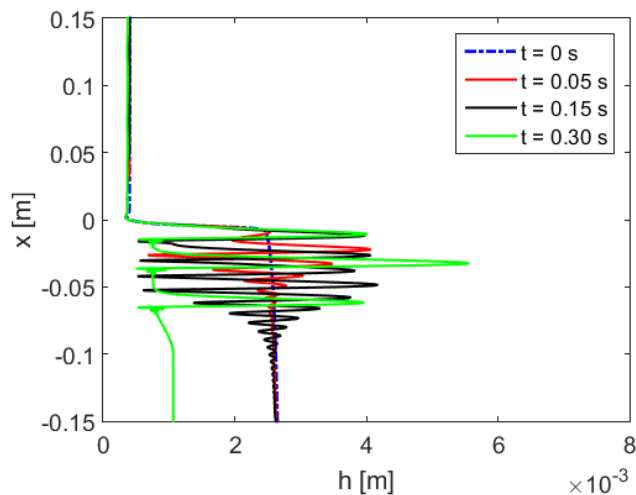


Figura 43: Evolución temporal del perfil de espesores para el escurrido neumático calculado mediante el modelo integral de película líquida inicializado con el modelo 1D.

En contrapartida, la región de la película final muestra una evolución suave entre la inicialización del modelo 1D y la solución estable con este modelo.

5.3.2.4 Ecurrido neumático sin inicialización de la película fluida

En este caso lo que se pretende es realizar una comprobación acerca de la importancia de la inicialización de los cálculos. Básicamente la diferencia con el caso anterior es que en vez de inicializar el dominio con la solución del modelo 1D, se parte de un espesor subcrítico adherido al sustrato y se deja evolucionar en base a la acción del campo de presiones. Como se observa en la Figura 44, la película empieza a disminuir su espesor aguas abajo, y aumentar aguas arriba según lo esperado. Los problemas comienzan a aparecer cuando se produce la ruptura de la onda generada en el runback, aproximadamente para $t = 0.175$ s.

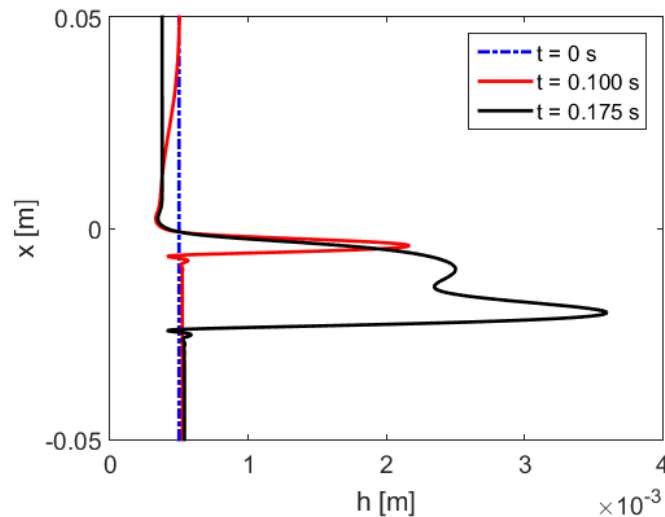


Figura 44: Evolución temporal del perfil de espesores para el escurrido neumático calculado mediante el modelo integral de película líquida inicializado con un flujo subcrítico adherido al sustrato.

5.3.2.5 Consideraciones acerca del modelo integral

En este apartado se han probado distintos casos de estudio que tanto por separado como en conjunto simulan distintos aspectos de las regiones de flujo encontradas en los procesos de escurrido neumático. Esto nos permite realizar un análisis específico de cuáles pueden ser los orígenes de las inestabilidades numéricas encontradas en algunos de los cálculos.

Por un lado, se comprueba cómo la parte aguas abajo del punto de escurrido correspondiente a la película final no es la causante de los problemas ya que exhibe un comportamiento estable en todos los casos. En esta región se desarrolla un flujo subcrítico, que también ha sido calculado de forma aislada sin haber sido detectados problemas de ningún tipo.

Por otro lado, en la zona del runback más cercana al punto de impacto se comienzan a generar inestabilidades de gran amplitud que rápidamente se extienden a todo el dominio aguas arriba. El runback de forma contraria a la película final puede ser visto como un flujo supercrítico, para el cual se han obtenido resultados con los mismos fenómenos de inestabilidad.

Las simulaciones con la rampa de presión sobre placa plana descartan que sea el campo de presiones introducido el que genere las inestabilidades. Aquí además, al no inicializar el dominio en velocidad y tener la gravedad en dirección normal al sustrato no se generan flujos supercríticos.

En resumen, las pruebas realizadas con el modelo integral hace sospechar que no es posible simular este tipo de flujos caracterizados por un cambio de sentido en la velocidad a través del espesor, lo que puede venir provocado porque la velocidad media de la película podría dejar de tener significado.

Otra de las limitaciones del modelo es que debido a su formulación integral no es posible simular el fenómeno de *splashing*, caracterizado por la ruptura de parte del runback en gotas debido a la acción violenta del chorro de gas. Esto es así porque a cada celda del dominio le corresponde un valor de espesor.

6 CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS FUTURAS

Se ha llevado a cabo un estudio numérico del proceso de escurrido neumático en base a 3 modelos numéricos que difieren en su grado de fidelidad respecto a la realidad. Las simulaciones 3D bifásicas basadas en la metodología Volume of Fluid (VOF) para el modelado multifásico y Large Eddy Simulation (LES) para el cálculo turbulento de chorro, han servido para la validación del modelo y la investigación complementaria de los orígenes de las ondulaciones. Se ha probado a utilizar un modelo integral de película líquida basado en las ecuaciones de Navier-Stokes integradas a lo largo del espesor. El objetivo es analizar la precisión en el cálculo del proceso de escurrido neumático en vistas a su utilización en el ámbito industrial dado el compromiso entre precisión y coste computacional. El modelo analítico 1D basado en las teorías de lubricación ha servido de base para la comparativa entre los modelos, ofreciendo estimaciones de calidad de los perfiles de espesor a cambio de un reducido coste computacional.

En cuanto a la validación de las simulaciones 3D VOF LES de alta fidelidad, se ha demostrado su capacidad para reproducir con precisión las características más importantes del proceso en base a la comparativa con los resultados experimentales [12], [13]. En este sentido, las simulaciones numéricas han mostrado el mismo comportamiento para la película líquida en lo referente a los patrones de formación de las ondulaciones tanto en la película final como en el runback. De igual forma, el chorro de gas presenta un movimiento oscilante con tendencia a desviarse hacia la parte inferior del dominio similar a lo detectado experimentalmente.

Las simulaciones de alta fidelidad también han servido para reafirmar la hipótesis del acoplamiento hidrodinámico entre el chorro de gas y la película líquida, que propone que la generación de las ondulaciones está producida por el acoplamiento entre ambas fases. La formación periódica de ondas en el runback afecta al confinamiento de la parte inferior del chorro de gas, produciendo una depresión en esta zona que hace que el chorro se doble ligeramente hacia abajo. Este confinamiento variable debido a la evolución de las ondas del runback genera una modificación periódica de la eficacia de escurrido del chorro de gas que se traslada aguas abajo en la película final. En este sentido, la prueba realizada con el inyector simétrico ha reafirmado esta idea, ya que el cambio de geometría únicamente afecta al confinamiento de la recirculación de la parte inferior del chorro que acaba propagándose también en la película final.

Tanto el modelo integral como el modelo 1D se tratan de aproximaciones “one-way” en las que se obvia el acoplamiento entre ambas fases y se asume que la película líquida no tiene influencia en el comportamiento del chorro, lo cual solo es válido para ciertas condiciones. La acción del gas se modela por medio de la distribución de gradiente de presiones y esfuerzo cortante, comúnmente obtenidos de correlaciones sobre placa plana disponibles en la literatura en función de los parámetros de escurrido. En este caso, se ha probado por medio de simulaciones de alta fidelidad con y sin película líquida que el líquido afecta al chorro de gas disminuyendo el gradiente de presiones máximo. Esto hace que los espesores obtenidos en base a esta hipótesis sean inferiores a los reales y a los numéricos obtenidos con modelos de alta fidelidad.

El modelo integral de película líquida se ha planteado como una alternativa de compromiso entre coste computacional y precisión orientada a su aplicación industrial. En base a un modelo ya implementado en OpenFOAM, se ha modificado y compilado una versión propia que incluye la distribución del gradiente de presiones sobre la película. En el código modificado solo se ha introducido la influencia de la presión en base a que la influencia del esfuerzo cortante es despreciable según las estimaciones realizadas con el modelo 1D. El código del modelo de película líquida modificado ha permitido llevar a cabo una serie de

pruebas para identificar alguna de sus limitaciones. Hasta el momento no se ha conseguido simular con éxito el problema de escurrido neumático debido a inestabilidades de la solución generadas en la zona del runback, que junto con las pruebas complementarias parecen apuntar a que el modelo tiene problemas en el cálculo de este tipo de flujos. Contrariamente, la parte del flujo correspondiente a la película final exhibe un comportamiento estable y físico marcado por una evolución suave del campo inicial de espesor a valores cercanos a los encontrados en las simulaciones de alta fidelidad y experimentos.

Es importante destacar alguno de los aspectos “secundarios” de este proyecto a los que se ha tenido que dedicar gran parte del tiempo y que han supuesto todo un reto debido al alto coste computacional de las simulaciones. Los cálculos de alta fidelidad están basados en modelos muy precisos que disparan los requerimientos técnicos, hasta el punto de que se han tenido que hacer peticiones de recursos especiales a la RES (Red Española de Supercomputación), la cual nos ha permitido realizar cálculos prioritarios en dos de los superordenadores de la red: el Finisterrae II del CESGA (Centro de Supercomputación de Galicia) bajo la solicitud FI-2018-3-0040 y en el Tirant de la Universidad de Valencia bajo la solicitud FI-2019-1-0044, cubriendo un total de 8 meses con más de 3 millones de horas asignadas. Por otro lado, el procesado de los datos ha sido un gran desafío. La cantidad de información generada es muy alta, tanto que se han tenido que desarrollar scripts de filtrado de los ficheros de salida para limitar la cantidad de datos almacenada. Además, se han desarrollado todos los algoritmos de procesado de resultados para la obtención de figuras, espesores medios y demás características clave.

El trabajo futuro se orienta a profundizar el estudio de los dos modelos numéricos sobre los que se ha sustentado este proyecto. Las simulaciones de alta fidelidad han probado ser de gran utilidad, por lo que se propone continuar con los cálculos con el fin de aumentar la ventana temporal disponible para los procesados, así como probar diferentes geometrías y condiciones de escurrido. También se plantea el uso de metodologías más avanzadas de procesado de los resultados como el mPOD (*Multi-scale Proper Orthogonal Decomposition*) realizado en [13]. En cuanto al modelo integral, es necesario continuar con las pruebas para confirmar las hipótesis acerca de las limitaciones del modelo en base a cálculos con presiones más reducidas que no conduzcan a la formación de runback. Además, también se propone incluir la acción del esfuerzo cortante en el código para descartar este motivo como el origen de las inestabilidades y comprobar su influencia en la película.

Para finalizar, comentar que el contenido de este trabajo fin de máster ha sido presentado en el *3rd Iberian Meeting of OpenFOAM Technology Users* de este año 2019 en Oporto, y ha sido aceptado para su presentación oral en el *European Coating Symposium* que se celebrará en septiembre en la localidad alemana de Heidelberg. Asimismo, este trabajo sirve como preámbulo de una tesis doctoral en el Programa Oficial de Doctorado en Ingeniería Naval e Industrial por la Universidad de la Coruña y que tiene como título “Modelos numéricos para la simulación de flujos gas-líquido en el proceso de galvanización”.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] A. Gosset, “Study of the interaction between a gas flow and a liquid film entrained by a moving surface,” Université Libre de Bruxelles, 2007.
- [2] J. A. Thornton and H. F. Graff, “An analytical description of the jet finishing process for hot-dip metallic coatings on strip,” *Metall. Trans. B*, vol. 7, no. 4, pp. 607–618, Dec. 1976.
- [3] C. H. Ellen and C. V. Tu, “An Analysis of Jet Stripping of Liquid Coatings,” *J. Fluids Eng.*, vol. 106, no. 4, p. 399, Dec. 1984.
- [4] E. O. Tuck, “Continuous coating with gravity and jet stripping,” *Phys. Fluids*, vol. 26, no. 9, p. 2352, Sep. 1983.
- [5] E. A. Elsaadawy, G. S. Hanumanth, A. K. S. Balthazaar, J. R. McDermid, A. N. Hrymak, and J. F. Forbes, “Coating Weight Model for the Continuous Hot-Dip Galvanizing Process,” *Metall. Mater. Trans. B*, vol. 38, no. 3, pp. 413–424, Jul. 2007.
- [6] A. Gosset and J.-M. Buchlin, “Jet Wiping in Hot-Dip Galvanization,” *J. Fluids Eng.*, vol. 129, no. 4, p. 466, Apr. 2007.
- [7] W. J. Edwards, A. J. Carlton, G. F. Harvey, R. F. K. Evans, and P. J. McKerrow, “Coating mass control system design for a continuous galvanizing line,” *Automatica*, vol. 12, no. 3, pp. 225–235, May 1976.
- [8] C. V. Tu and C. H. Ellen, “Stability of liquid coating in the jet stripping process,” in *Proceedings 9th Australasian Fluid Mechanics Conference*, 1986, pp. 8–12.
- [9] G. C. Hocking, W. L. Sweatman, A. D. Fitt, and C. Breward, “Deformations during jet-stripping in the galvanizing process,” *J. Eng. Math.*, vol. 70, no. 1–3, pp. 297–306, Jul. 2011.
- [10] K. Myrillas, A. Gosset, P. Rambaud, and J. M. Buchlin, “CFD simulation of gas-jet wiping process,” *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, vol. 166, no. 1, pp. 93–97, Jan. 2009.
- [11] W. Eßl, C. Pfeiler, G. Reiss, W. Ecker, C. K. Riener, and G. Angeli, “LES-VOF Simulation and POD Analysis of the Gas-Jet Wiping Process in Continuous Galvanizing Lines,” *steel Res. Int.*, vol. 89, no. 2, p. 1700362, Feb. 2018.
- [12] A. Gosset, M. A. Mendez, and J.-M. Buchlin, “An experimental analysis of the stability of the jet wiping process: Part I – Characterization of the coating uniformity,” *Exp. Therm. Fluid Sci.*, vol. 103, pp. 51–65, May 2019.
- [13] M. A. Mendez, A. Gosset, and J.-M. Buchlin, “Experimental analysis of the stability of the jet wiping process, part II: Multiscale modal analysis of the gas jet-liquid film interaction,” *Exp. Therm. Fluid Sci.*, vol. 106, pp. 48–67, Sep. 2019.
- [14] D. Lacanette, A. Gosset, S. Vincent, J.-M. Buchlin, and É. Arquis, “Macroscopic analysis of gas-jet wiping: Numerical simulation and experimental approach,” *Phys. Fluids*, vol. 18, no. 4, p. 042103, Apr. 2006.
- [15] “OpenFOAM User Guide.” [Online]. Available: <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/>.
- [16] Buc, “Modelling of gas jet wiping in Thin Liquid Films and Coating Processes,” in *VKI Lecture Series*, 1997.
- [17] H. Yoneda, “Analysis of Air-Knife Coating,” University of Minnesota, 1993.
- [18] E. Ljungskog, “Description of reactingParcelFilmFoam,” 2014.

- [19] K. Meredith, Y. Xin, and J. de Vries, "A Numerical Model for Simulation of Thin-Film Water Transport over Solid Fuel Surfaces," *Fire Saf. Sci.*, vol. 10, pp. 415–428, 2011.
- [20] C. . Hirt and B. . Nichols, "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries," *J. Comput. Phys.*, vol. 39, no. 1, pp. 201–225, Jan. 1981.
- [21] W. J. Rider and D. B. Kothe, "Reconstructing Volume Tracking," *J. Comput. Phys.*, vol. 141, no. 2, pp. 112–152, Apr. 1998.
- [22] A. Bakker, "Lecture 10: Turbulence Models." [Online]. Available: <http://www.bakker.org/cfm>.
- [23] S. Beltaos and N. Rajaratnam, "PLANE TURBULENT IMPINGING JETS," *J. Hydraul. Res.*, vol. 11, no. 1, pp. 29–59, Jan. 1973.
- [24] C. V. Tu and D. H. Wood, "Wall pressure and shear stress measurements beneath an impinging jet," *Exp. Therm. Fluid Sci.*, vol. 13, no. 4, pp. 364–373, Nov. 1996.
- [25] M. A. Mendez, "Dynamics of Gas Jet Impinging on Falling Liquid Films," Université Libre de Bruxelles, 2018.
- [26] K. Myrillas, "Experimental and Numerical Investigation of Gas Jet and Liquid Film Interaction," Université Libre de Bruxelles, 2011.
- [27] D. Barreiro Villaverde and A. Gosset, "Partial wetting effects in the thin film solver reactingParcelFilmFoam," in *2nd Iberian Meeting of OpenFOAM Technology Users*, 2018.
- [28] D. Barreiro Villaverde and A. Gosset, "3D VOF-LES Simulations of the Jet Wiping Process," in *3rd Iberian Meeting of OpenFOAM Technology Users*, 2019.
- [29] H. K. (Henk K. Versteeg and W. (Weeratunge) Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics : the finite volume method*. Pearson Education Ltd, 2007.
- [30] H. Jasak, "Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows," University of London, 1996.