ANÁLISIS NUMÉRICO DEL CHORRO COMPRESIBLE DE HIDRÓGENO EN UNA CÁMARA DE VOLUMEN CONSTANTE

LAURA SOFIA LAITON MONROY
ARNOLD ESTEBAN MORENO MORENO

TRABAJO DE GRADO PARA OPTAR EL TÍTULO DE INGENIERO MECÁNICO

DIRECTOR
ING. CARLOS ANDRES ROMERO ARIZA

UNIVERSIDAD DISTRITAL FRANCISCO JOSÉ DE CALDAS
FACULTAD TECNOLÓGICA
INGENIERÍA MECÁNICA
BOGOTÁ, D.C.
2026

AGRADECIMIENTOS

La culminación de este proyecto no habría sido posible sin el acompañamiento de personas cuyo aporte, tanto técnico como humano, resultó determinante en cada etapa del proceso. En primer lugar, deseamos expresar nuestro más sincero agradecimiento a nuestras familias y seres queridos, quienes fueron el pilar y la estabilidad que nos sostuvieron en todo momento, incluso en las etapas más exigentes de este camino. Su paciencia, su aliento incondicional y su confianza fueron indispensables para mantener la motivación y la constancia necesarias para llegar hasta aquí.

De manera muy especial, a nuestro tutor por su valiosa asesoría y su guía experta a lo largo de todo el desarrollo del proyecto. Su disposición para orientarnos, su capacidad para brindarnos las mejores soluciones ante cada obstáculo y, sobre todo, su palabra de ánimo cuando el panorama se tornaba complejo. Su acompañamiento no solo enriqueció este trabajo, sino que también contribuyó a nuestra formación como profesionales.

Finalmente, consideramos que este proyecto representa un paso significativo hacia la continuidad de este tipo de análisis aplicados a sistemas termodinámicos. Esperamos que sirva de ejemplo, motivación y punto de partida para aquellos compañeros que deseen seguir esta misma línea de investigación, y que encuentren en este esfuerzo una base sobre la cual construir nuevos aportes al conocimiento.

CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS 2
CONTENIDO 3
ÍNDICE DE FIGURAS 6
ÍNDICE DE TABLAS 9
RESUMEN 10
ABSTRACT 10
INTRODUCCIÓN 12
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA 14
MARCO TEÓTICO Y ANTECEDENTES 16
JUSTIFICACIÓN 32
OBJETIVOS 33
Objetivo general 33
Objetivos específicos 33
PROCEDIMIENTO METODOLÓGICO 34
1.DÓMINIO FÍSICO 36
1.1 Descripción del sistema físico 36
1.2 Simplificación del dominio 38
1.3 Dimensiones y regiones del dominio 40
2. MODELO FÍSICO 46
2.1 Fluidos de trabajo 46
2.2 Parámetros de simulación 47
3.DISCRETIZACIÓN DEL MODELO 49
3.1 Generación de la malla 49
3.2 Independencia de malla 51
3.3 Características de la malla 52
4. ECUACIONES GOBERNANTES 54
4.1 Promedio de Favre 54
4.2. Conservación de masa 55
4.3. Conservación de la cantidad de movimiento 55

4.4 Modelo de turbulencia $k-\omega$ SST 57
4.5. Conservación de energía 58
4.6. Transporte de especies y modelo de difusividad 60
4.7 Modelo termofísico 62
5. Configuración del software 63
5.1 Propiedades termofísicas 63
5.2 Condiciones de frontera 64
6. Discretización de esquemas numéricos 66
6.1. Método de volúmenes finitos 66
6.2. Esquemas temporales 67
6.3. Esquemas espaciales 67
6.4. Construcción del sistema de ecuaciones algebraicas 70
7. SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES 71
7.1. Estrategia de acoplamiento presión-velocidad 71
7.2. Solvers lineales por campo 72
7.3. Factores de relajación y control de la solución 74
7.4. Restricciones físicas 74
8. SOLUCIÓN NUMÉRICA 75
8.1. Configuración de la corrida 75
8.2. Ejecución y paralelización 76
8.3. Monitoreo de convergencia y estabilidad 77
9. VALIDACIÓN 79
9.1. Determinación del umbral equivalente con las técnicas Schlieren 79
9.2 Parámetros de comparación 82
10. VARIACIÓN DE PARÁMETROS 84
10.1. Diseño del estudio paramétrico 84
10.2. Barrido de contrapresión 84
10.3. Barrido de velocidad y número de Mach 85
10.4. Post-procesamiento y análisis 85
RESULTADOS 88
1. CASOS DE VALIDACIÓN 88
1.1 Caso 1 contrapresión de 0kPa (g) 88
1.2 Caso 2 contrapresión de 150 kPa (g) 90

1.3 Análisis de resultados de validación 92
2. VARIACIÓN DE LA CONTRAPRESIÓN 93
2.1 Comportamiento del chorro a partir de la fracción másica en el eje axial y la inflamabilidad 94
2.2 Comportamiento del chorro a partir de la fracción másica en el eje radial y la inflamabilidad 95
2.3 Análisis de resultados de la variación de la contrapresión 96
3. VARIACIÓN DE LA VELOCIDAD 98
3.1 Comportamiento del chorro a partir de la fracción másica en el eje axial y la inflamabilidad 99
3.2 Comportamiento del chorro a partir de la fracción másica en el eje radial y la inflamabilidad 101
3.3 Análisis de resultados de la variación de la velocidad 103
CONCLUSIONES 105
REFERENCIAS 107
ANEXOS 111
Anexo A. Configuración caso de validación (BP=150 kPa, NPR=3.10) 111
A.1 blockMeshDict 111
A.2 physicalProperties 115
A.3 momentumTransport 116
A.4 Condiciones de frontera (0/) 117
A.5 fvSchemes 124
A.6 fvSolution 126
A.7 controlDict 128

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Imágenes Schlieren Configuración Tipo Z 17
Figura 2. Chorro En Conductos Convergente Y Divergente 20
Figura 3. Distribución De Energía Y Escalas En El Modelado De Turbulencia 22
Figura 4. Método Analítico Jerárquico 24
Figura 5. Simulated Hrr (Left) And Average In-Cylinder Temperature (Right) Results For All Three Fuel Conditions At Imep ¼ 10.6 Bar. Vertical Lines Represent The Commanded Start Of The Pilot (Dotted) And Main (Dash-Dot) Injections. 25
Figura 6. Dispersión Moléculas 27
Figura 7. Simulación De Rans Y Les De Un Flujo En Una Cámara Con Diferentes Intensidades 29
Figura 8. Modelo De Turbulencia K-E 30
Figura 9. Procedimiento Metodológico De La Simulación Cfd De Inyección Directa De Hidrógeno En Cámara De Volumen Constante 35
Figura 10. Esquema Del Mecanismo Pistón-Cilindro Con La Ubicación Del Punto Muerto Inferior (Pmi) Y El Pistón Posicionado En El Punto Muerto Superior (Pms). 36
Figura 11. Representación Esquemática De La Cámara De Combustión, Incluyendo El Inyector Lateral De H2, El Desarrollo Del Chorro, La Bujía De Ignición Y El Medio Receptor De Aire 37
Figura 12. Dimensiones De La Cámara De Combustión 38
Figura 13. Condición Axisimétrica Vista Desde La Geometría Completa 38
Figura 14. Geometría 2d Axisimétrica 39
Figura 15. Dimensiones Axial Y Radial 39
Figura 16. Sección Angular Wedge. 40
Figura 17. Dimensiones De La Geometría En Paraview 41
Figura 18. División Simétrica De Semiángulos Para Cálculo De Dimensiones Y Y Z 41
Figura 19. Regiones De La Geometría. 43
Figura 20. Región Del Inyector (Inlet) 43
Figura 21. Región De Wall Injector Y Región Outlet 44
Figura 22. Regiones Del Wedge_Pos Y Wedge_Neg 44
Figura 23. División De La Malla 50
Figura 24. División De La Malla 50
Figura 25. Refinamiento De La Malla En El Dominio 51
Figura 26. Refinamiento De La Malla En El Dominio 52
Figura 27. Configuración De Propiedades Termofísicas 63
Figura 28. Volumen De Control Del Método De Volúmenes Finitos: Celda P, Celda Vecina N, Cara Compartida F, Vector De Área S_F Y Vector De Distancia D 67
Figura 29. Sección Fvschemes Empleado En Las Simulaciones 69
Figura 30. Interpolación Upwind: El Valor En La Cara F Toma El De La Celda Situada Aguas Arriba Según El Sentido Del Flujo ($\Phi_F = \Phi_P$ Si $F \geq 0$; $\Phi_F = \Phi_N$ Si $F < 0$) 70

Figura 31. Diagrama De Flujo Del Algoritmo Pimple: Lazo Externo (Simple) Y Lazo Interno De Corrección De Presión (Piso), Con Los Correctores Empleados (Noutercorrectors = 1, Ncorrectors = 2) 72
Figura 32. Configuración Representativa Del Diccionario Fvsolution (Pendiente De Ajustar Al Archivo Definitivo). 73
Figura 33. Diccionario Controldict Empleado En Las Simulaciones. 76
Figura 34. Diccionario Decomposepardict Empleado En Las Simulaciones 76
Figura 35. Evolución De Los Residuales Iniciales De Cada Campo (Escala Logarítmica) Y Del Número De Courant Máximo A Lo Largo De La Corrida, Con La Referencia Del Maxco = 0,2 78
Figura 36. Detección De H2 En Un Experimento Schlieren 79
Figura 37. Detección Schlieren Vs Simulación Cfd. Elaboración Propia 81
Figura 38. Análisis De Sensibilidad Del Umbral Equivalente Schlieren – T=2ms, Ue=1314.5 M/S, T=300k. 82
Figura 39. Perfil De Fracción Másica De H_2 Frente A La Distancia, Con Zona De Inflamabilidad 86
Figura 40. Penetración Axial Del Chorro En Función Del Tiempo Para Los Casos Analizados 87
Figura 41. Simulación Caso 1: Velocidad Del Sonido Del Hidrógeno (Ue = 1314.5 M/S), La Presión De Inyección (Pinj = 800 Kpa (G)) Y La Temperatura Ambiente (T= 300 K), Con Una Contrapresión Pb = 0 Kpa (G) 89
Figura 42. Perfil Axial De Fracción Másica H2 – T =2ms. Velocidad Del Sonido Del Hidrógeno (Ue = 1314.5 M/S), La Presión De Inyección (Pinj = 800 Kpa (G)) Y La Temperatura Ambiente (T= 300 K), Con Una Contrapresión Pb = 0 Kpa (G) Y Npr = 7.69 90
Figura 43. Simulación Caso 2: Velocidad Del Sonido Del Hidrógeno (Ue = 1314.5 M/S), La Presión De Inyección (Pinj = 800 Kpa (G)) Y La Temperatura Ambiente (T= 300 K), Con Una Contrapresión Pb = 150 Kpa (G) 90
Figura 44. Perfil Axial De Fracción Másica H2 – T =2ms. Velocidad Del Sonido Del Hidrógeno (Ue = 1314.5 M/S), La Presión De Inyección (Pinj = 800 Kpa (G)) Y La Temperatura Ambiente (T= 300 K), Con Una Contrapresión Pb = 150 Kpa (G) Y Npr =3.10 92
Figura 45. Simulaciones Variación De Contrapresión – T =2ms. Velocidad Del Sonido Del Hidrógeno (Ue = 1314.5 M/S), La Presión De Inyección (Pinj = 10000 Kpa (G)) Y La Temperatura Ambiente (T= 300 K), Con Una Contrapresión P_B1 = 2000 Kpa, Pb2 = 3055 Kpa, Pb3 = 31 93
Figura 46. Perfil Axial De Fracción Másica H2– T =2ms. Velocidad Del Sonido Del Hidrógeno (Ue = 1314.5 M/S), La Presión De Inyección (Pinj = 10000 Kpa (G)) Y La Temperatura Ambiente (T= 300 K), Con Una Contrapresión Pb1, Pb2, Pb3 Y Pb4 95
Figura 47. Penetración Radial Y Fracción Másica En X=44mm - T =2ms. Velocidad Del Sonido Del Hidrógeno (Ue = 1314.5 M/S), La Presión De Inyección (Pinj = 10000 Kpa

(G)) Y La Temperatura Ambiente (T= 300 K), Con Una Contrapresión Pb1 -Pb2-Pb3-Pb4 96
Figura 48. Simulaciones Variación De Velocidad De Inyección – T = 2 Ms. Presión De Inyección (Pinj = 10000 Kpa (G)), Temperatura Ambiente (T = 300 K) Y Contrapresión (Pb = 3055 Kpa), Con Velocidades De Inyección Del Hidrógeno Ue1, Ue2 Y Ue3 98
Figura 49. Perfil Axial De Fracción Másica De H2 – T = 2ms. Velocidades De Inyección Ue1 = 1051.6 M/S (M = 0.8), Ue2 = 1314.5 M/S (M = 1.0) Y Ue3 = 1600 M/S (M = 1.2), Con Una Presión De Inyección (Pinj = 10000 Kpa), Contrapresión (Pb = 3055 Kpa) Y T=300k 101
Figura 50. Penetración Radial Y Fracción Másica En X = 44mm – T = 2ms. Velocidades De Inyección Ue1 = 1051.6 M/S (M = 0.8), Ue2 = 1314.5 M/S (M = 1.0) Y Ue3 = 1600 M/S (M = 1.2), Con Una Presión De Inyección (Pinj = 10000 Kpa), Contrapresión (Pb = 3055 Kpa), Tamb 102

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Regiones Del Dominio En Openfoam. 45
Tabla 2. Propiedades Termofísicas De Las Especies 46
Tabla 3. Parámetros De Simulación 48
Tabla 4. Características De La Malla 53
Tabla 5. Configuración De Las Condiciones De Frontera En Openfoam 65
Tabla 6. Matriz De Casos Del Estudio Paramétrico. 84
Tabla 7. Parámetros Teóricos Caso Sin Bp (Npr = 7.69) Ue Impuesta Directamente Como Condición De Frontera. 89
Tabla 8. Parámetros Teóricos Caso Con Pb = 150kpa (G) (Npr = 7.69) Ue Impuesta Directamente Como Condición De Frontera 91
Tabla 9. Penetración Axial Y Fracción Másica En X=44mm — T=2ms P_Inlet=10000 Kpa, Ue=1314.5 M/S · T=300k, Lfl=0.29% Másico, Ufl=17.3% Másico 94
Tabla 10. Penetración Radial Y Fracción Másica En X=44mm — T=2ms P_Inlet=10000 Kpa, Ue=1314.5 M/S · T=300k, Lfl=0.29% Másico, Ufl=17.3% Másico 96
Tabla 11. Resumen Comparativo Axial Y Radial T=2ms · P_Inlet=10mpa · Ue=1314.5 M/S · T=300k - Zt Ufl: Inicio Zona Inflamable Axial · Zt Lfl: Fin Zona Inflamable Axial Lfl=0.29% Másico · Ufl=17.3% Másico. 97
Tabla 12. Parámetros De Simulación Para La Variación De La Velocidad — T = 2ms 99
Tabla 13. Penetración Axial Y Fracción Másica En X = 44mm — T = 2ms · Pinj = 10000 Kpa · Pb = 3055 Kpa · T = 300k · Lfl = 0.29% Másico · Ufl = 17.3% Másico 100
Tabla 14. Penetración Radial Y Fracción Másica En X = 44mm — T = 2ms · Pinj = 10000 Kpa · Pb = 3055 Kpa · T = 300k · Lfl = 0.29% Másico · Ufl = 17.3% Másico 102
Tabla 15. Resumen Comparativo Axial Y Radial — T = 2ms · Pinj = 10000 Kpa · Pb = 3055 Kpa · T = 300k · Npr = 3.27 — Xufl: Inicio Zona Inflamable Axial · Rufl–Rlfl: Zona Inflamable Radial En X = 44mm · Lfl = 0.29% Másico · Ufl = 17.3% Másico 104

RESUMEN

El presente trabajo desarrolla un análisis numérico mediante una simulación por Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) del comportamiento de un chorro compresible de hidrógeno gaseoso (H2) inyectado en una cámara de combustión de volumen constante, bajo condiciones representativas de un motor de combustión interna de inyección directa al momento de la ignición. La simulación se implementó en OpenFOAM 12 mediante un dominio 2D axisimétrico tipo wedge de 10°, reduciendo significativamente el costo computacional respecto a un modelo tridimensional completo.

Se empleó el solver multicomponentFluid con el modelo de turbulencia $K-\omega$ SST y las ecuaciones de conservación de masa, momento, energía y transporte de especies para una mezcla H2-aire no reactiva. El modelo fue validado con los datos experimentales de Delbari et al. (2025), obteniendo errores relativos de 0.5% y -2.3% en la predicción de la penetración axial del chorro para los casos de contrapresión Pb = 0kPa (g) (NPR = 7.69) y Pb = 150kPa (g) (NPR = 3.10), respectivamente.

El análisis paramétrico evaluó el efecto de la contrapresión (2000, 3055, 3171 y 4000 kPa) y la velocidad de inyección (1051.6, 1314.5 y 1600 m/s) sobre la penetración axial, la dispersión radial y la inflamabilidad en la posición de la bujía (X=44mm). Los resultados evidenciaron que el incremento de la contrapresión reduce la penetración axial y favorece la dilución del H_2, siendo la contrapresión de 4000 kPa (NPR=2.5) la única condición con mezcla completamente inflamable en X=44mm. Por su parte, la variación de la velocidad de inyección demostró que a mayor velocidad se amplía la dispersión radial del chorro pero se retrasa la disponibilidad axial de mezcla inflamable en la posición de la bujía, evidenciando que ambos parámetros deben optimizarse de forma conjunta para garantizar una ignición efectiva.

Palabras clave: Hidrógeno, CFD, OpenFOAM, inyección directa, chorro compresible, inflamabilidad, contrapresión, $K-\omega$ SST.

ABSTRACT

This study presents a numerical analysis using Computational Fluid Dynamics (CFD) simulation to examine the behavior of a compressible hydrogen gas (H_2) jet injected into a constant-volume combustion chamber under conditions representative of a direct-injection internal combustion engine at the moment of ignition. The simulation was implemented in OpenFOAM 12 using a 2D axisymmetric 10° wedge domain, significantly reducing the computational cost compared to a full three-dimensional model.

The multicomponentFluid solver was used with the k−ω SST turbulence model and the equations of conservation of mass, momentum, energy, and species transport for a nonreactive H_2–air mixture. The model was validated using experimental data from Delbari et al. (2025), yielding relative errors of 0.5% and −2.3% in the prediction of the jet's axial penetration for

the backpressure cases Pb = 0 kPa (g) (NPR = 7.69) and Pb = 150 kPa (g) (NPR = 3.10), respectively.

The parametric analysis evaluated the effect of back pressure (2000, 3055, 3171, and 4000 kPa) and injection velocity (1051.6, 1314.5, and 1600 m/s) on axial penetration, radial dispersion, and flammability at the spark plug position (X = 44 mm). The results showed that increasing back pressure reduces axial penetration and promotes H_2 dilution, with a back pressure of 4000 kPa (NPR = 2.5) being the only condition with a fully flammable mixture at X = 44 mm. Meanwhile, variations in injection velocity demonstrated that higher velocities increase the radial dispersion of the jet but delay the axial availability of the flammable mixture at the spark plug position, indicating that both parameters must be optimized together to ensure effective ignition.

Keywords: Hydrogen, CFD, OpenFOAM, direct injection, compressible jet, flammability, backpressure, k−ω SST

INTRODUCCIÓN

La transición hacia fuentes de energía más limpias ha impulsado la búsqueda de combustibles alternativos capaces de reducir la dependencia de los derivados del petróleo sin renunciar a la flexibilidad operativa de los motores de combustión interna. Entre estas alternativas, el hidrógeno se distingue por su ausencia de carbono en la molécula, su elevada velocidad de llama y su amplio rango de inflamabilidad, características que lo convierten en un candidato atractivo para motores de encendido por compresión y de inyección directa, especialmente en aplicaciones de transporte pesado donde la electrificación completa aún enfrenta limitaciones de autonomía y densidad energética. Sin embargo, aprovechar estas propiedades exige un conocimiento detallado de cómo se comporta el chorro de hidrógeno una vez ingresa a la cámara de combustión, pues de ello depende que la mezcla con el aire alcance, en el lugar y el momento correctos, una concentración apta para la ignición.

El reto técnico central de la inyección directa de hidrógeno gaseoso radica en que el chorro se forma bajo condiciones de flujo compresible y, en la mayoría de los casos de interés práctico, subexpandido: la presión de inyección supera ampliamente la presión de la cámara, de modo que el gas se expande de forma abrupta a la salida de la boquilla, generando estructuras de onda y gradientes de concentración que evolucionan rápidamente en el tiempo y en el espacio. La mezcla hidrógeno–aire únicamente es apta para la ignición dentro de una ventana de inflamabilidad acotada —entre el límite inferior (LFL) y el límite superior (UFL) de fracción másica—, de manera que tanto un exceso de combustible cerca de la boquilla como una dilución excesiva lejos de ella impiden el encendido. Determinar en qué posición axial y radial, y durante qué intervalo de tiempo, la mezcla permanece dentro de dicha ventana constituye, por tanto, un problema de naturaleza esencialmente transitoria y tridimensional en su física, aunque abordable mediante simplificaciones geométricas razonadas.

La caracterización experimental de este fenómeno enfrenta dificultades considerables: los ensayos con motores ópticos y técnicas de visualización Schlieren, como los desarrollados por Delbari et al. (2025) y Yeganeh et al. (2024), requieren instalaciones especializadas, instrumentación de alta velocidad y condiciones de operación cuidadosamente controladas, lo que limita el número de configuraciones que pueden explorarse en un mismo estudio. Frente a estas restricciones, la simulación numérica mediante dinámica de fluidos computacional (CFD) se ha consolidado como una herramienta complementaria indispensable, al permitir explorar de manera sistemática y a un costo considerablemente menor un espacio de condiciones de operación —presiones, velocidades y regímenes de flujo— más amplio que el accesible experimentalmente, siempre que el modelo numérico haya sido previamente validado contra datos de referencia confiables.

En este marco, el presente trabajo de grado se propuso analizar el comportamiento dinámico y la mezcla de un chorro compresible de hidrógeno inyectado en una cámara de volumen constante mediante simulación CFD en OpenFOAM. Para ello se definió primero una estrategia de simulación —dominio axisimétrico tipo wedge, modelos físicos y condiciones de frontera— que fue verificada frente a los datos experimentales de Delbari et al. (2025), con errores de penetración axial inferiores al 3%. Una vez confirmada la validez del modelo, el

esfuerzo se concentró en dos frentes complementarios, correspondientes a los dos objetivos específicos que orientan la discusión de resultados de este documento: simular el comportamiento transitorio del chorro de hidrógeno bajo diferentes condiciones de inyección, y analizar el desempeño del proceso de inyección a partir de la mezcla, la expansión y la distribución espacial del chorro obtenidas en dichas simulaciones.

El primer frente exigió reproducir la evolución temporal del chorro —no únicamente su estado en un instante fijo— bajo distintas condiciones de frontera, variando de forma independiente la contrapresión de la cámara (entre 2000 y 4000 kPa) y la velocidad de inyección (entre los regímenes subsónico, sónico y supersónico, con Mach de 0.8 a 1.2), mientras se mantenían constantes la presión de inyección y la temperatura. Esta aproximación permitió aislar el efecto de cada variable sobre la dinámica del chorro y observar fenómenos que un análisis en estado estacionario no captura, como el tiempo que tarda la zona inflamable en alcanzar la posición de la bujía de encendido, los máximos y las oscilaciones transitorias de concentración que preceden a la estabilización de la mezcla, y la posibilidad de que una posición determinada transite de una condición sobre-enriquecida a una condición inflamable —o viceversa— antes de que concluya la ventana temporal de interés para el encendido.

El segundo frente se centró en traducir esa información transitoria en indicadores de desempeño del proceso de inyección directamente relevantes para el diseño del motor: la extensión y la ubicación de la zona inflamable a lo largo del eje del chorro, el ancho de dicha zona en la sección transversal donde se ubica la bujía, y la fracción másica de hidrógeno disponible en ese punto en el instante de análisis. El análisis conjunto de la expansión axial y de la distribución espacial radial permitió establecer si, en la posición fija de la bujía, la mezcla se encuentra dentro del rango de inflamabilidad del hidrógeno en aire (0.29% a 17.3% en fracción másica) y qué combinación de contrapresión y velocidad de inyección favorece dicha condición.

Los resultados de estos dos frentes se presentan de forma articulada en la sección de resultados del documento, organizados en dos estudios paramétricos complementarios —uno de contrapresión, con la velocidad de inyección fija en el régimen sónico, y otro de velocidad, con la contrapresión fija—, seguidos en cada caso de un análisis comparativo que integra los indicadores axiales, radiales y temporales obtenidos. Esta estructura busca que el lector pueda seguir, de forma progresiva, cómo cada parámetro de operación modifica la disponibilidad espacial y temporal de una mezcla hidrógeno–aire apta para la ignición, y cómo dicha comprensión puede orientar decisiones de diseño en motores de inyección directa de hidrógeno orientados a la descarbonización del transporte de carga pesada.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El transporte de carga pesada actualmente depende de manera casi exclusiva del uso de combustibles fósiles, principalmente del diésel, debido a su elevada densidad energética, confiabilidad operativa y compatibilidad con motores de encendido por compresión. International Renewable Energy Agency (IRENA, s. f.) señala que los camiones pesados representan aproximadamente el 95 % del consumo total de diésel en el transporte terrestre, y, pese a constituir solo cerca del 9 % del parque vehicular global, son responsables de alrededor del 25 % de las emisiones de CO_2 relacionadas con el transporte, lo que representa aproximadamente 5 % de las emisiones globales de dióxido de carbono (equivalente acerca de 1,89 Gt CO_2) provenientes del sector transporte por carretera.

Además, el transporte en su conjunto contribuye al 15,9 % de las emisiones mundiales de gases de efecto invernadero (GEI), siendo uno de los sectores con mayor impacto sobre el cambio climático. Estas emisiones incluyen importantes cantidades de CO_2, óxidos de nitrógeno (NOx) y partículas (PM2,5), asociadas directamente con la combustión de hidrocarburos derivados del petróleo. En contraste, The International Council on Clean Transportation (The ICCT, s. f.-b) menciona que el uso de hidrógeno como combustible, especialmente cuando se produce a partir de fuentes renovables, permite reducciones sustanciales de emisiones de GEI, hasta un 89 % respecto al diésel si el hidrógeno es producido con electricidad 100 % renovable, aunque dichas reducciones dependen críticamente del origen energético del hidrógeno.

En este contexto, el hidrógeno se ha posicionado como un combustible alternativo con alto potencial para aplicaciones en motores de combustión interna, particularmente en configuraciones de inyección directa, debido a su elevada reactividad y a la posibilidad de integrarlo en arquitecturas de motores existentes. Estudios experimentales recientes han permitido caracterizar el comportamiento de chorros subexpandidos de hidrógeno y mezclas hidrógeno–metano, identificando parámetros relevantes como la penetración del chorro, el retardo de ignición y la influencia de la relación de presiones en la tobera (NPR), la presión de cámara y la temperatura de ignición sobre el proceso de combustión.

A pesar de que el hidrógeno representa una alternativa prometedora para la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero en el transporte pesado, su estudio experimental presenta limitaciones significativas debido a los altos costos de infraestructura, la complejidad de los sistemas de medición y la limitada disponibilidad de motores ópticos para el análisis del proceso de combustión. En consecuencia, la comunidad científica ha recurrido a las simulaciones numéricas para investigar el comportamiento del hidrógeno dentro de la cámara de combustión, abordando fenómenos como la dinámica del chorro, los procesos de mezcla, la difusividad, el retardo de ignición y la evolución de la liberación de calor. No obstante, las simulaciones CFD también plantean desafíos técnicos, ya que la resolución simultánea de las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento, energía, entre otros, requieren de elevados recursos computacionales.

En este sentido, la selección del modelo de turbulencia se convierte en un aspecto crítico del estudio. Mientras que la Simulación Numérica Directa (DNS) permite resolver todas las escalas

turbulentas con alta fidelidad, su costo computacional la hace poco viable para aplicaciones prácticas; la Simulación de Grandes Escalas (LES) representa una alternativa intermedia al resolver las estructuras turbulentas de mayor energía; y el enfoque RANS, al promediar las propiedades del flujo en el tiempo, ofrece una solución computacionalmente más accesible para estudios aplicados. Por lo tanto, surge la necesidad de evaluar y seleccionar metodologías de modelado que permitan representar adecuadamente la inyección del hidrógeno, garantizando un equilibrio entre precisión y viabilidad computacional.

MARCO TEÓTICO Y ANTECEDENTES

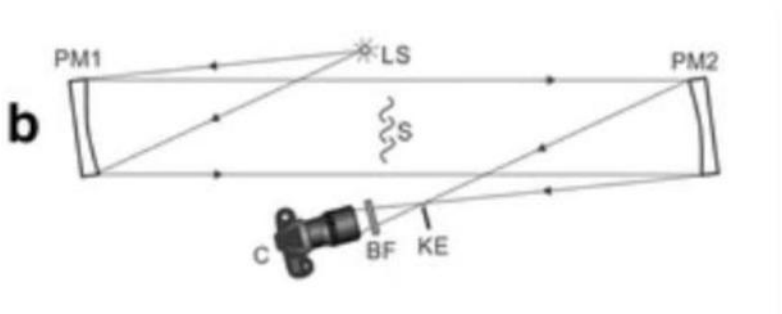
Las emisiones de gases de efecto invernadero representan una amenaza significativa para el medio ambiente, lo que ha impulsado la búsqueda de soluciones orientadas a reducir su impacto. Entre estas alternativas se encuentra el uso de combustibles más limpios que permitan disminuir los niveles de contaminación asociados al sector transporte. En este contexto, el hidrógeno se ha posicionado como una posible opción para reemplazar los combustibles tradicionales, lo que ha motivado en los últimos años el desarrollo de diversos estudios enfocados en caracterizar su comportamiento bajo diferentes condiciones de operación. Para ello, se han realizado múltiples experimentos utilizando motores ópticos y simulaciones numéricas, con el fin de analizar la dinámica del chorro y evaluar el efecto de la variación de parámetros iniciales, permitiendo así identificar las condiciones más adecuadas para el uso eficiente del hidrógeno como combustible.

Yeganeh et al. (2024) realizan un estudio experimental para evaluar la dinámica del chorro de hidrógeno en condiciones de inyección directa dentro de una cámara de volumen constante. El objetivo principal de la investigación fue caracterizar el comportamiento del chorro y analizar su influencia en la formación de la mezcla aire–combustible, considerando la geometría de la boquilla del inyector, el ángulo de inyección y la duración de inyección. Los investigadores utilizaron un inyector de gas Bosch de solenoide diseñado para bajas presiones, en este caso la presión era de 2,5 MPa, variando su ángulo de inclinación del inyector a 10°, 15° y 20°. Además, emplearon tres configuraciones de boquilla: un solo orificio, dos orificios y múltiples orificios. El análisis del chorro lo realizaron mediante imágenes Schlieren tipo Z, las cuales fueron posteriormente procesadas en MATLAB y Python.

Las imágenes Schlieren son una técnica óptica que permite la visualización de variaciones en gases y fluidos transparentes, las cuales no pueden observarse mediante fotografía convencional. Este método funciona con una configuración de espejos o lentes que dirigen un rayo de luz colimada a través de un medio de interés, en el caso de los autores Yeganeh et al. (2024) el chorro de hidrógeno. Asimismo, Traldi et al. (2018) destacan que el haz de luz atraviesa regiones que presenten un cambio de densidad o temperatura, se detectan variaciones de refracción desviando ligeramente los rayos de luz, que se representan en contrastes de intensidad produciendo una imagen.

Existen diferentes configuraciones del sistema Schlieren, las cuales se distinguen principalmente por la disposición de los espejos y el recorrido óptico del haz. Entre ellas se encuentra la configuración tipo Z, caracterizada por una trayectoria de la luz en forma de “Z”. Este diseño incrementa la sensibilidad del sistema al ampliar el recorrido óptico y mejorar la detección de pequeñas desviaciones de los rayos (Kouchi et al., 2016), lo que la hace especialmente adecuada para visualizar flujos turbulentos o chorros de baja densidad, como los presentes en motores de combustión interna. (Ver figura 1)

Figura 1. *Imágenes Schlieren configuración tipo Z*



Nota. Tomado de "Schlieren imaging: A powerful tool for atmospheric plasma diagnostic", por Traldi et al., 2018, *EPJ Techniques and Instrumentation, 5*(1), 4. https://doi.org/10.1140/epjti/s40485-018-0045-1

A partir de las imágenes Schlieren se pueden identificar las diferentes zonas del chorro, según el artículo de revisión de Uddin et al. (2024), hay tres zonas principales. La primera corresponde a la región de chorro libre, en la cual se introduce el hidrógeno con un caudal determinado y a alta velocidad. En esta zona, el fuerte gradiente de velocidad entre el combustible y el aire presente en la cámara generan esfuerzos cortantes que inducen turbulencia y favorecen el fenómeno de entrainment, promoviendo la incorporación de aire al chorro. Como consecuencia, se produce una expansión radial progresiva, una redistribución del momento y la formación de una velocidad no uniforme, además de gradientes locales de densidad y temperatura. (Uddin et al., 2024)

La segunda región es la zona de impacto o estancamiento, que se presenta cuando el chorro colisiona con una superficie. En este punto, la velocidad axial disminuye abruptamente hasta aproximarse a cero, transformándose parte de la energía cinética en presión estática. Este fenómeno provoca un aumento local de presión y la posterior redistribución del flujo en dirección radial. (Uddin et al., 2024)

Finalmente, se encuentra la región de chorro de pared (wall jet), en la cual el flujo se desplaza radialmente hacia el exterior, paralelo a la superficie. En esta zona, la velocidad máxima no se localiza en el punto de impacto, sino aproximadamente a una distancia equivalente a un diámetro del chorro desde la región de estancamiento. Este comportamiento es válido para relaciones geométricas comprendidas en el rango $0<H/D<12$, donde H representa la distancia entre la boquilla y la pared, y D el diámetro del chorro. Además, la alta turbulencia cercana a la superficie incrementa significativamente la transferencia de calor. (Uddin et al., 2024)

En cuanto a los resultados experimentales, Yeganeh et al. (2024) encontraron que con la boquilla de un orificio se presentó mayor velocidad de penetración, pero una menor expansión del chorro, mientras que la boquilla con dos orificios tuvo una menor velocidad de penetración y una mayor expansión radial, lo que favorece una mezcla aire–hidrógeno más uniforme, en el caso de la boquilla con múltiples orificios obtuvieron resultados intermedios entre ambas geometrías. Adicionalmente, las imágenes mostraron que en todos los casos se presenta una mayor expansión en la región de chorro libre. Los autores observaron que en los ángulos de 10° y 15° la combinación de aire - hidrógeno fue más homogénea y tuvo una mejor distribución,

sin embargo, con el ángulo de 20° se presentaron acumulaciones locales en la cámara, produciendo una mezcla no homogénea. En cuanto al tiempo de inyección Yeganeh et al. (2024) concluyeron que no tiene una influencia significativa en el comportamiento del chorro bajo las condiciones analizadas.

Los estudios no solo se han centrado en el comportamiento del chorro y el cómo el ángulo de inyección afecta a la distribución del combustible, sino que también han considerado los riesgos asociados al uso de hidrógeno en motores de combustión interna, derivados de sus propiedades físicas y químicas. Como lo mencionan Crowl y Jo (2007) en su investigación, el hidrógeno presenta un amplio rango de inflamabilidad, baja energía mínima de ignición y alta velocidad de llama en comparación con combustibles convencionales como la gasolina o el gas natural. Estas características incrementan la probabilidad de fenómenos como la preignición y la combustión anormal, lo que puede ocasionar daños estructurales en el motor y representar riesgos operativos significativos. Con base a lo anterior, han surgido nuevas líneas de investigación orientadas a identificar estrategias que permitan controlar la formación de mezcla y limitar condiciones que producen combustiones indeseadas.

En este contexto, Panthi et al. (2026) realizan el estudio de la combustión de hidrógeno mediante la inyección directa en un motor diésel óptico modificado para encendido por chispa, siendo su objetivo principal analizar la combustión bajo condiciones de mezcla pobre. Para ello, utilizaron un motor de 1200 RPM junto con un inyector Bosch HDEV4 que inyectaba hidrógeno puro a 60 bar. Usaron un sensor de presión piezoeléctrico AVLGH01D para poder medir la presión dentro del cilindro, a partir de la cual se obtuvieron curvas de presión y liberación de calor para 20 ciclos de combustión, aplicando la primera ley de la termodinámica y una aproximación cuadrática de la temperatura del gas. Adicionalmente, los autores utilizaron imágenes de luminosidad natural de la llama a 36.000 fps para analizar el desarrollo del núcleo de llama y su propagación, junto con la técnica OH-PLIF, que permitió identificar las zonas de reacción a alta temperatura dentro de la cámara de combustión.

Los académicos concluyeron que con una relación aire-combustible de 3.8 la combustión es estable, ya que no se presenta detonación, ni combustión anormal, sin embargo, con una mezcla pobre se presentaron perdidas de energía, que se atribuyen a una quema incompleta del hidrógeno. Además de esto Panthi et al. (2026) cambiaron el momento de encendido para comparar resultados con un encendido tardío (-15° CA) se presentó una presión baja en el cilindro y se obtuvo una combustión más homogénea y se muestra un solo aumento en la tasa de liberación de calor, mientras que con un encendido temprano (-25° a – 30° CA), los investigadores obtuvieron un aumento de presión e identificaron dos etapas en la liberación de calor, lo cual lo asociaron con la estratificación de la mezcla, lo cual fue corroborado mediante las imágenes de luminosidad de la llama y OH-PLIF.

Con lo anterior, se debe considerar diferentes aspectos que aseguren la confiabilidad en el hidrógeno como un combustible alternativo, por ejemplo, la formación de la mezcla aire-combustible influye en la temperatura de la llama, la eficiencia térmica, la presión dentro del cilindro y la tasa de liberación de calor. En donde, la estratificación permite tener un control al generar una mezcla heterogénea, concentrando una la mezcla más rica en zonas cercanas a la

bujía y manteniendo el resto del volumen con una mezcla pobre. Esto ayuda a estabilizar el encendido, disminuir las emisiones, y favorece la combustión. (Elsevier, s. f.)

No obstante, incluso bajo estrategias de estratificación, el hidrógeno presenta desafíos asociados a su alta velocidad de llama, amplio rango de inflamabilidad y baja energía de ignición, lo que puede favorecer fenómenos de combustión anormal. Por ello, se han investigado alternativas orientadas a mitigar estos riesgos, entre las cuales destaca la mezcla del hidrógeno con metano, buscando modificar la reactividad y controlar el proceso de ignición.

En la búsqueda de estrategias que permitan mitigar la alta reactividad del hidrógeno en aplicaciones de combustión interna, Delbari et al. (2025) realizaron un estudio experimental orientado a caracterizar los procesos de inyección e ignición de hidrógeno puro y mezclas hidrógeno–metano en una cámara de combustión estática. Los autores analizaron la penetración del chorro para el hidrógeno, metano, argón y helio por separado; la formación de mezcla y el retardo de ignición con H2 y CH4. Para la primera parte del estudio, los investigadores inyectaron las sustancias con una presión de 800kPa, una duración de inyección de 2,5 ms, para este análisis inicial tuvieron en cuenta la relación de presión de la boquilla (NPR), el caudal másico y consideraron que la velocidad de salida del flujo del inyector era igual que la velocidad del sonido.

Para analizar el comportamiento del chorro gaseoso, los autores asumieron un flujo compresible dentro del inyector y un régimen de flujo estrangulado en la salida de la tobera. Bajo esta condición, el flujo alcanza Mach 1 en la garganta (área efectiva), lo que implica que la velocidad del fluido en ese punto es igual a la velocidad del sonido, calculada a partir de la ecuación 1. Esta condición se presenta cuando la relación de presiones entre la entrada del inyector y la cámara receptora supera un valor crítico, haciendo que el caudal másico sea independiente de la presión aguas abajo, para calcular el caudal (Ecuación 2), se debe tener en cuenta la relación específica de calor del gas (γ), la presión total aguas arriba (Pt), la temperatura total aguas arriba (Tt), el área transversal de la boquilla (A*) y la constante de los gases ideales (R). (Delbari et al., 2025)

Ecuación 1. Velocidad del sonido

$$a = \sqrt{\gamma RT}$$

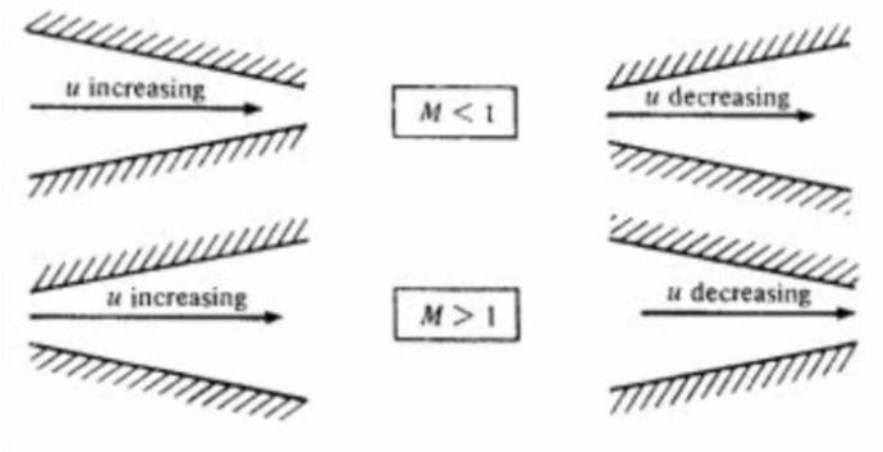
Ecuación 2. Caudal másico

$$\dot{m} = \frac{P_t A *}{\sqrt{RT_t}} \cdot \sqrt{\gamma} \cdot \left(\frac{\gamma + 1}{2}\right)^{(\gamma+1)/2(\gamma+1)}$$

De acuerdo con la teoría de flujo compresible desarrollada por Anderson (2021), el régimen del flujo se caracteriza mediante el número de Mach, el cual clasifica el comportamiento en subsónico (M < 1), sónico (M = 1) y supersónico (M > 1). En un flujo cuasi-unidimensional, como el que puede asumirse dentro del inyector del trabajo de Delbari et al. (2025), las propiedades varían predominantemente en dirección axial, y la relación entre el área y la velocidad depende del régimen del flujo. Para M < 1, el flujo acelera al disminuir el área (conducto convergente), mientras que para M > 1, el flujo acelera al aumentar el área (conducto

divergente), ver figura 2. La condición sónica ocurre en el área mínima del conducto, conocida como garganta.

Figura 2. *Chorro en conductos convergente y divergente*



Nota. Tomado de Modern compressible flow: With historical perspective (4th ed., Fig. 5.3), por J. D. Anderson, 2021, McGraw-Hill Education.

La relación entre el área y el número de Mach se describe mediante la ecuación 3, donde se afecta la relación de presión NPR (Ecuación 4), en donde se tiene el Pt y el Pb que es la presión de la cámara de inyección, mientras que la variación de presión y velocidad puede analizarse a partir de la ecuación de Euler (Ecuación 5), que evidencia que una disminución de presión produce una aceleración del fluid. Si la expansión posterior al orificio es suficientemente fuerte, el chorro puede experimentar una expansión supersónica fuera del inyector, afectando la tasa de momento y la penetración del chorro dentro de la cámara. (Anderson, 2021)

Ecuación 3. Relación del área de boquilla con el número de Mach

$$\left(\frac{A}{A*}\right)^2 = \frac{1}{M^2}\left[\frac{2}{\gamma+1}\cdot\left(1+\frac{\gamma-1}{2}\right)\cdot M^2\right]^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}$$

Ecuación 4. Relación de presión en la boquilla (NPR)

$$NPR = \frac{P_t}{P_b}$$

Ecuación 5. Ecuación de Euler

$$dP = -\rho u\, du$$

Teniendo en cuenta lo anterior, Delbari et al. (2025) analizaron la influencia del Nozzle Pressure Ratio (NPR) sobre la tasa de penetración del chorro, la cual se expresa en función de la tasa de momento del chorro (Ecuación 6). En dicha relación, Z’ (t) representa la penetración axial del chorro,M.n la tasa de momento en la salida del inyector y ρch la densidad del gas

ambiente dentro de la cámara. Los resultados obtenidos para H_2, CH_4, Ar y He mostraron que, a pesar de sus diferencias en densidad y propiedades termodinámicas, la penetración no presentó variaciones significativas entre los cuatro gases. Este comportamiento se atribuye a que, bajo condiciones de flujo estrangulado, la velocidad en la salida del orificio es sónica y el caudal másico depende principalmente de la presión total aguas arriba y de la geometría del inyector, lo que conduce a tasas de momento similares. (Delbari et al., 2025)

Sin embargo, aunque la dinámica macroscópica del chorro fue comparable, el proceso de ignición mostró diferencias importantes. En particular, el hidrógeno puro, debido a su baja energía mínima de ignición, amplio rango de inflamabilidad y elevada velocidad de llama, presentó tiempos de encendido más cortos y un desarrollo de combustión más rápido. Esto puede generar incrementos abruptos de presión y mayor riesgo de combustión anormal. Este comportamiento evidencia la estrecha relación entre la dinámica del chorro y la estabilidad del proceso posterior de ignición. (Delbari et al., 2025)

Ecuación 6. Penetración axial

$$Z't/\left(\frac{Mn}{\rho ch}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Ecuación 7. Tasa de momento

$$Mn = m \cdot \alpha$$

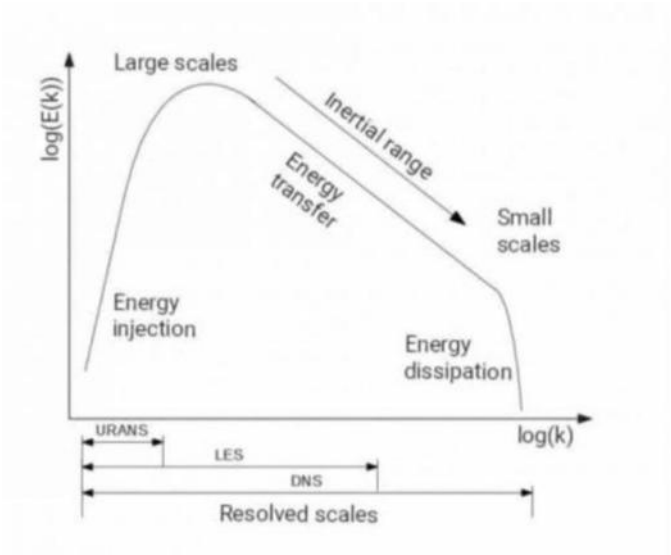
Al incorporar metano en la mezcla Delbari et al. (2025) observaron una modificación significativa en la reactividad global del combustible, incrementando el retardo de ignición y reduciendo la intensidad inicial de la liberación de calor. La mezcla hidrógeno–metano mostró un comportamiento más controlado y estable en comparación con el hidrógeno puro, lo que sugiere que la composición del combustible influye directamente en la formación de mezcla y en la evolución de la combustión. Estos resultados refuerzan la importancia de estudiar las condiciones de inyección y la distribución espacial del combustible antes de la ignición, ya que puede optimizar la combustión reduciendo los riesgos que se pueden presentar en la combustión del hidrógeno.

Yang et al. (2022) realizan un estudio más centrando en la combustión anormal del hidrógeno a partir del método Analítico Jerárquico (AHP – Analytic Hierarchy Process), con el objetivo de evaluar la influencia de los parámetros de inyección con los que se puede producir una combustión anormal. Para la investigación utilizaron datos correspondientes a un motor monocilíndrico de encendido por chispa, adaptado a inyección directa de hidrógeno, con la finalidad de determinar anomalías al momento de hacer la combustión, con esto, mediante el software CREO los investigadores desarrollaron la geometría del motor y poder variar el ángulo del inyector. En la simulación variaron el ángulo de inyector (20°, 30°, 45° y 60°), el caudal de inyección (4.36, 4.96, 5.29, y 6.12 kg/h) y la relación equivalente entre el aire y el combustible (0.5, 0.67), con el fin de identificar condiciones asociadas a la combustión anormal.

Dentro de las simulaciones CFD es fundamental considerar la turbulencia, ya que esta permite aproximar el comportamiento numérico al fenómeno físico real, especialmente en flujos de alta velocidad como los chorros de inyección. Para modelar la turbulencia existen tres modelos base: la Simulación Numérica Directa (DNS), las ecuaciones promediadas de Reynolds (RANS) y la Simulación de Grandes Escalas (LES) (IdealSimulations, 2019). A partir de estos enfoques se desarrollan modelos específicos como k–ε, k–ω, k–ζ–f, Reynolds Stress Model (RSM) o modelos híbridos industriales. El DNS resuelve todas las escalas turbulentas sin modelado, aunque su costo computacional es elevado; el LES resuelve las grandes estructuras y modela las pequeñas escalas; mientras que el RANS promedia las ecuaciones de Navier–Stokes y modela los esfuerzos turbulentos, siendo el más utilizado en aplicaciones de ingeniería por su menor costo computacional.

La figura 3 representa el espectro de energía turbulenta en función del número de onda, el cual es inversamente proporcional al tamaño de las estructuras del flujo. En las escalas grandes se produce la inyección de energía, asociada a la geometría o a fenómenos como la inyección del chorro; posteriormente, en el rango inercial, la energía se transfiere hacia escalas cada vez más pequeñas; finalmente, en las escalas pequeñas ocurre la disipación viscosa. La parte inferior de la figura muestra que el DNS resuelve todas las escalas turbulentas, el LES resuelve únicamente las grandes y modela las pequeñas, mientras que el RANS no resuelve estructuras turbulentas instantáneas, sino que modela su efecto promedio sobre el flujo.

Figura 3. *Distribución de energía y escalas en el modelado de turbulencia*



Nota. Tomado de *Turbulence models in CFD*, por IdealSimulations, 2019 (https://www.idealsimulations.com/resources/turbulence-models-in-cfd/).

El fundamento matemático del estudio de la turbulencia está estrechamente relacionado con el número de Reynolds, el cual expresa la relación entre fuerzas inerciales y fuerzas viscosas (IdealSimulations, 2019). Pope (2013), el número de Reynolds permite caracterizar el régimen del flujo mediante las ecuaciones 8 y 9, en donde 2δ es el diámetro efectivo del chorro, $\overline{U}$ es la

velocidad media del flujo, v es la viscosidad cinética; para la ecuación 9 Uo es la velocidad de salida del fluido de la boquilla y δ es el radio de la boquilla. Para el caso de los modelos DNS, RANS y LES las ecuaciones 10, 11 y 12 respectivamente representan la cantidad de movimiento, en donde, p es la densidad, ui es el componente de velocidad, t es el tiempo, P la presión, Tij es el tensor de esfuerzos viscosos y –pui*uj es el tensor de Reynolds, por otra parte, la ecuación 13 representa el tensor de esfuerzos subgrid. (Pope, 2013)

En el libro se expone que la mayor turbulencia en las paredes de las superficies, en este sentido si el número de Reynols es menor a 1,350 se tiene un flujo laminar, pero si es mayor a 1,800 es un flujo turbulento. Pope describe tres zonas del flujo fundamentales para comprender los esfuerzos de Reynols, el área de la pared viscosa, en donde la viscosidad predomina; la región logarítmica, aquí se evidencia una velocidad logarítmica; por último, el núcleo. (Pope, 2013)

Ecuación 8. Caracterización del flujo bajo el número de Reynolds a partir de la velocidad media

$$Re \equiv (2\delta)\,\overline{U}/\nu$$

Ecuación 9. Caracterización del flujo bajo el número de Reynolds a partir de la velocidad de salida del fluido

$$Re \equiv U_0\,\delta/\nu$$

Ecuación 10. Modelo DNS

$$\frac{\partial(\rho ui)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uiuj)}{\partial xj} = \frac{\partial p}{\partial xi} + \frac{\partial cij}{\partial xj}$$

Ecuación 11. Modelo RANS

$$\frac{\partial(\bar{p}\bar{u})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\overline{u}\overline{u_y})}{\partial xj} = \frac{\partial p}{\partial xi} + \frac{\partial cij}{\partial xj}(rij - \bar{\rho}\overline{u'}\overline{u'y})$$

Ecuación 12. Modelo LES

$$\frac{\partial(\rho\widetilde{ui})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\tilde{u}i\widetilde{uj})}{\partial xj} = \frac{\partial\tilde{p}}{\partial xi} + \frac{\partial\widetilde{cij}}{\partial xj} - \frac{\partial c_{ij}^{sgs}}{\partial xj}$$

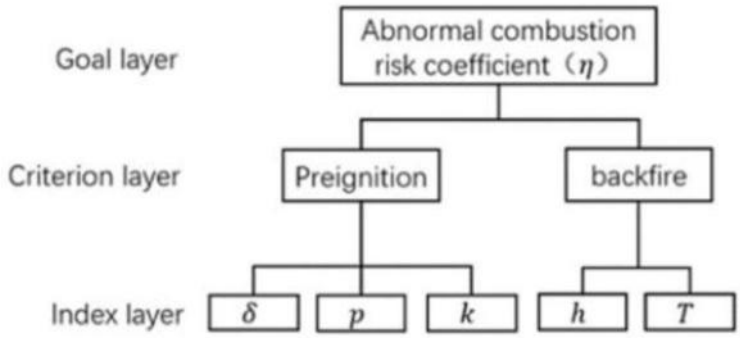
Ecuación 13. Tensor de esfuerzos subgrid

$$\&r_{ij}^{sgs} = \rho(\widetilde{u\tilde{u}y} - \widetilde{ui\tilde{u}j})$$

Yang et al. (2022) consideraron al hidrógeno como un gas ideal y emplearon el modelo de turbulencia k–ζ–f, ya que este proporcionaba mayor precisión, aunque los cálculos computacionales tomaron aproximadamente 15% más de tiempo más que los demás modelos de turbulencia. Además, hicieron uso de diferentes ecuaciones de control como conservación de masa, energía, entre otros. Para poner en práctica el método AHP los autores dividieron el

estudio en tres partes, primero como objetivo principal la identificación de una combustión anormal, luego establecieron dos criterios, la pre-ignición y el contrafuego, y, por último, analizaron indicadores de cada criterio, ver figura 4. Con lo anterior, Yang et al. (2022) Llegaron a la conclusión de que la combustión anormal no solo depende de un factor, sino de la integración de estos. En particular, con mayores ángulos de inyección se presenta una mezcla más homogénea, pero si se excede puede ser contraproducente, con el caudal observaron que al aumentarlo obtienen una mejor distribución del combustible, pero en exceso genera acumulaciones locales. A partir del análisis AHP, se determinaron que hay menor probabilidad de pre-ignición con un caudal de 4.36 y 4.96 kg/h, con un ángulo de 20° y 45° y una relación de equivalencia de 0.5 y 0.67 respectivamente.

Figura 4. *Método Analítico Jerárquico*



Nota. Tomado de "Diagnosis and control of abnormal combustion of hydrogen internal combustion engine based on the hydrogen injection parameters", por Z. Yang et al., 2022, *International Journal of Hydrogen Energy, 47*(35), 15887–15895. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.03.031

La simulación en CFD permite realizar otros estudios como el comportamiento del chorro un instante después de la inyección, Barbato y Cantore (2021) Simularon la inyección directa de hidrógeno a un motor de combustión interna, con el objetivo de analizar la formación y distribución del combustible dentro de la cámara de combustión comparando sus resultados junto con datos experimentales existentes. En la investigación hicieron uso de datos experimentales de un motor monocilíndrico SoPH de la *Engine Combustion Network (ECN),* con inyección directa de hidrógeno a 100 bar mediante un inyector de una boquilla con un ángulo de inclinación de 50°; a partir de estos resultados Barbato y Cantore (2021) procedieron a hacer simulaciones en el software STAR-CCM+ resolviendo ecuaciones RANS, implementando el modelo de turbulencia *K-Épsilon* de dos capas y considerando al hidrógeno como gas ideal. Además de esto, los autores, usaron una malla adaptativa al ángulo del cigüeñal y llevaron a cabo un estudio de sensibilidad del tamaño de la malla y el paso temporal de la simulación.

La difusividad se define como la propiedad física que describe la velocidad de transferencia de masa de una especie química en un medio, regida fundamentalmente por la Ley de Fick

Ecuación 14. Ley de Fick

$$Ji = -D_{i,m} A Y_i$$

Donde J_i es el flujo de masa de hidrógeno, $D_{i,m}$ es el coeficiente de difusión y AY_i es el gradiente de fracción másica.

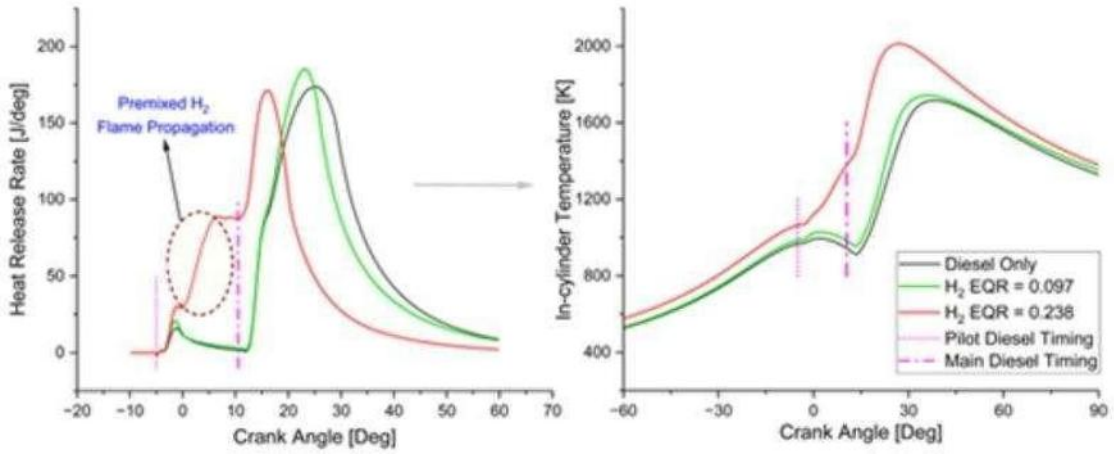
En el estudio de motores de combustión dual hidrógeno-diésel, el hidrógeno destaca por poseer un coeficiente de difusión molecular excepcionalmente alto en comparación con el diésel y otros hidrocarburos, lo que facilita una mezcla rápida y una mayor penetración en zonas de aire estancado de la cámara. Esta elevada difusividad de masa, al compararse con la difusividad térmica, resulta en un número de Lewis. (Farzam & McTaggart-Cowan, 2024)

Ecuación 15. Número de Lewis

$$Le = \frac{\alpha}{D}$$

Donde α es la difusividad térmica y D es la difusividad de masa. Para el hidrógeno, D es muy alto, lo que hace que $Le \approx 0.3$, facilitando la propagación de la llama en condiciones críticas. Lo que promueve la inestabilidad termo-difusiva y permite la propagación de la llama en condiciones de mezcla extremadamente pobre. No obstante, la investigación de Lakshya et al. (2024) demuestra que esta propiedad interactúa críticamente con los parámetros de inyección: si el tiempo de inyección es demasiado breve, la alta difusividad no logra compensar la falta de tiempo para una dispersión uniforme en el colector de admisión, provocando desequilibrios de potencia de hasta el 13.5% entre cilindros. Este fenómeno de dispersión limitada es un precursor directo de las variaciones en el retraso de ignición y la tasa de liberación de calor (HRR), factores que determinan la eficiencia térmica y el nivel de emisiones del motor. (Farzam & McTaggart-Cowan, 2024)

Figura 5. *Simulated HRR (left) and average in-cylinder temperature (right) results for all three fuel conditions at IMEP ¼ 10.6 bar. Vertical lines represent the commanded start of the pilot (dotted) and main (dash-dot) injections.*



Nota. Tomado de "Hydrogen-diesel dual-fuel combustion sensitivity to fuel injection parameters in a multi-cylinder compression-ignitionengine", por R. Farzam y G. McTaggart-

Cowan, 2024, *International Journal of Hydrogen Energy, 49*, 850–867. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.09.124

En el marco del estudio de motores Cardelle y Carloni (2024) menciona que operan con la mezcla estequiometria de hidrógeno y oxígeno, la difusividad se define como la propiedad de transporte que cuantifica la facilidad con la que las moléculas de se desplazan a través de la mezcla gaseosa debido a gradientes de concentración. Según el enfoque del ITBA, esta propiedad es el pilar de la "mezcla ultrarrápida", permitiendo que el hidrógeno, al ser la molécula más pequeña y ligera, se disperse de manera casi instantánea en la cámara de combustión. Esta elevada difusividad molecular (aproximadamente cuatro veces superior a la del aire) es la que garantiza una mezcla homogénea incluso en condiciones de inyección directa a alta presión, minimizando la formación de "puntos calientes" que podrían derivar en retroceso de llama (*flashback*) o pre-ignición.

Ecuación de Chapman-Enskog para Gases:

Utilizada en modelos computacionales para predecir cómo varía la difusividad con la temperatura y la presión, variables críticas en el ciclo de compresión del motor:

Ecuación 16. Ecuación de Chapman-Enskog para Gases

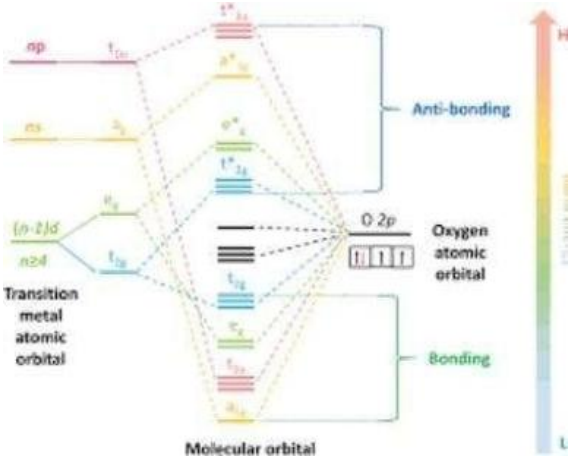
$$D_{AB} = 0.0018583 \cdot \frac{\sqrt{T3 \cdot \left(\frac{1}{MA} + \frac{1}{MB}\right)}}{P \cdot \sigma^2 AB \cdot \cap D}$$

Aquí, σ_{AB} es el diámetro de colisión y $\cap_D$ la integral de colisión, lo que explica por qué a altas temperaturas de combustión en motores de $H2/O2$, la difusividad aumenta exponencialmente.

Homogeneización de la Mezcla: A diferencia de los combustibles fósiles, la difusividad del hidrógeno permite una combustión completa y extremadamente rápida, lo cual es vital para el ciclo teórico de presión constante.

Para ilustrar este concepto en tu trabajo, se suelen utilizar diagramas de gradientes de fracción másica obtenidos mediante CFD (Dinámica de Fluidos Computacional). En estos mapas de calor, se observa cómo el hidrógeno inyectado penetra en el oxígeno y desaparecen rápidamente los gradientes de color, indicando una mezcla perfecta. (Cardelle & Carloni, 2024)

Figura 6. *Dispersión moléculas*



Nota. Tomado de Zhao, Z., Zhao, C., Huang, Y., Zhao, Q., Wang, C., Li, J., & Guo, Y. (2022). Facilitating layered oxide cathodes based on orbital hybridization for sodium-ion batteries: Marvelous air stability, controllable high voltage, and anion redox chemistry. Advanced Functional Materials, 32(35), 2203774. https://doi.org/10.1002/adfm.202203774

Se puede observar cómo la pequeña molécula de hidrógeno se dispersa con mayor rapidez que el oxígeno, facilitando la formación de la mezcla reactiva analizada en el trabajo del ITBA.

A partir de las simulaciones, Barbato y Cantore (2021) Observaron que el uso de una malla refinada permite obtener valores más precisos de la penetración y difusión del chorro con costos computacionales es más elevados. Sin embargo, al emplear una malla más gruesa se produce a una mayor difusión de hidrógeno y con esto una menor precisión en los resultados. Con el fin de reducir el costo computacional sin comprometer la exactitud, los investigadores incrementaron el paso temporal de la simulación, manteniendo la malla refinada, lo que permitió disminuir significativamente el tiempo de cálculo y mantener unos datos más confiables en comparación con los resultados experimentales. De este modo, demostraron que la metodología CFD propuesta constituye una herramienta adecuada para la predicción y el análisis de la inyección directa de hidrógeno en motores de combustión interna.

Babayev et al. (2021) realizaron una caracterización computacional de la inyección directa de hidrógeno y la combustión no premixed en un motor de combustión interna de encendido por compresión, con el objetivo de analizar las particularidades de este concepto frente a la combustión diésel convencional. Para ello, los autores desarrollaron un modelo numérico en 3D usando el software CONVERGE CFD, prestando especial atención a las características únicas del hidrógeno durante la inyección y el proceso de mezcla en el cilindro, y evaluaron la sensibilidad de la malla computacional para asegurar la calidad de los resultados. Además, Babayev et al. (2021) validaron los modelos numéricos frente a datos experimentales de cámara óptica de volumen constante y de ensayos de motor diésel, lo que permitió establecer una base confiable para la comparación y el análisis de las distintas fases de combustión entre el hidrógeno y el combustible diésel.

Babayev et al. (2021) encontraron que a diferencia de los chorros de diésel, los jets de hidrógeno no presentan un levantamiento pronunciado de la llama ni un arrastre de aire significativo cerca del inyector, produciendo una interfaz combustible–aire mucho más estratificado sin signos de pre-encendido (preximed) antes de la ignición. El proceso de combustión no premixed con hidrógeno se rige principalmente por una fase inicial de mezcla turbulenta libre del chorro seguida por una fase de mezcla global dentro del cilindro, siendo la primera mucho más dominante que en los motores diésel convencionales, lo que implica la necesidad de replantear las estrategias de optimización de motores de ignición por compresión cuando se utiliza hidrógeno como combustible.

Por otra parte, Akar y Özener (2024) analizaron numéricamente el movimiento de los gases dentro del cilindro en un motor de combustión interna de hidrógeno de servicio pesado con inyección directa de baja presión (LPDI), con el propósito de comprender mejor cómo se mezcla el hidrógeno con el aire para lograr una combustión estable y emisiones bajas bajo condiciones ultra-magras. Para ello se modelaron un motor de 13 L adaptado desde un diseño diésel existente, estableciendo condiciones de operación a potencia nominal mediante simulaciones unidimensionales que alimentaron modelos tridimensionales de dinámica de fluidos computacional (3D-CFD). Los autores modelaron parámetros como el índice de homogeneidad (HI) y la simetría del movimiento (SOM), además de los niveles de energía cinética turbulenta (TKE) y visualizaciones del cociente de equivalencia, los autores compararon configuraciones de número de vórtice de remolino (swirl), formas de pistón y diseños de tapa de inyector para identificar cuáles favorecen mayor mezcla y turbulencia dentro del cilindro.

En el contexto de la simulación 3D-CFD de motores de hidrógeno, Sfriso et al. (2025) mencionan que la Energía Cinética Turbulenta representa la energía media por unidad de masa asociada a los remolinos o "eddies" en un flujo turbulento. A diferencia de la energía del flujo medio, la TKE cuantifica la intensidad de las fluctuaciones de velocidad dentro del cilindro.

Para el estudio de mezclas muy pobres de hidrógeno, la TKE es el parámetro más crítico, ya que compensa la baja velocidad de llama laminar del hidrógeno en condiciones pobres. Una TKE alta durante el final de la carrera de compresión incrementa la tasa de transferencia de calor y masa, arrugando el frente de llama y aumentando la Velocidad de Combustión Turbulenta, lo que permite una combustión estable y completa. (Sfriso et al., 2025)

1. Definición Estadística:

La TKE se define matemáticamente a partir de las fluctuaciones de las componentes de la velocidad (u', v', w') respecto a su valor medio:

Ecuación 17. Definición estadística de TKE

$$k = \frac{1}{2}(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$$

Donde $\overline{u'2}$ es el promedio de los cuadrados de lasfluctuaciones de velocidad en los tres ejes.

2. Ecuación de Transporte (Modelo):

En las simulaciones 3D mencionadas en el artículo, la evolución de k dentro del cilindro se resuelve mediante una ecuación de conservación:

Ecuación 18. Ecuación de transporte del modelo

$$\frac{\&(pk)}{\&t} + \mathrm{A} * (\rho u k) = \mathrm{A} * [(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \mathrm{A}k] + \mathrm{P}_k - \rho\epsilon$$

- **Pk**: Representa la producción de TKE debida a los gradientes de velocidad media (esfuerzos de cizalla durante la admisión y compresión).
- ϵ: Es la tasa de disipación de la energía turbulenta en calor.
- $\boldsymbol{\mu t}$: Es la viscosidad turbulenta, calculada como $\mu t = C\mu p \frac{H2}{\epsilon}$

3. Relación con la Combustión:

El artículo valida cómo la TKE afecta la velocidad de llama turbulenta, a menudo expresada mediante modelos como el de Peters o Damköhler:

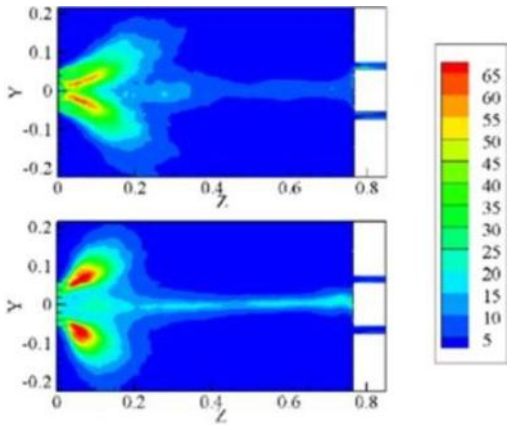
Ecuación 19: Modelo de Peters

$$S_t = S_l + u'_{rms} * f(Re, Da)$$

Donde $u'_{rms} = \sqrt{\frac{2}{3}k}$ es la intensidad de la turbulencia.

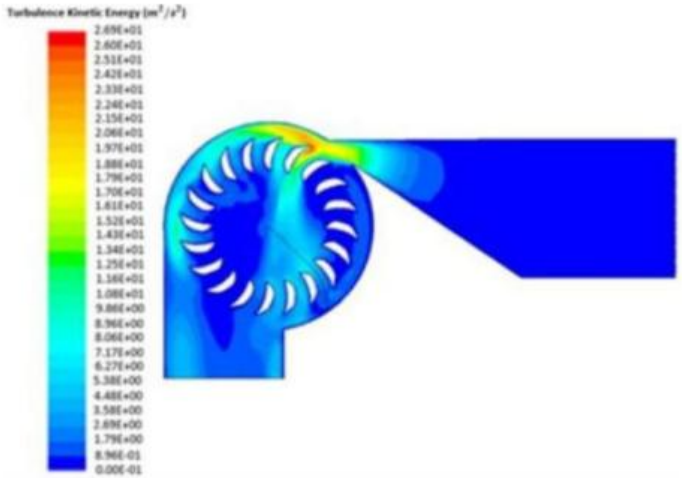
En las simulaciones de cilindros, la TKE suele visualizarse mediante planos de corte que muestran la evolución desde la válvula de admisión (donde se genera por el flujo de entrada) hasta el final de la compresión.

Figura 7. *Simulación de RANS y Les de un flujo en una cámara con diferentes intensidades*



Nota. Tomado de *Alzahrani, A., & Haidar, J. (2018). RANS and LES simulation of a swirling flow in a combustion chamber with different swirl intensities. Journal of Applied Fluid Mechanics, 11(2), 433-445. https://doi.org/10.18860/jafm.11.02.28292*

Figura 8. *Modelo de turbulencia k-ε*



Nota. Tomado de *Salim, M. S., Malek, M. A., & Jamiat, N. (2023). Optimization of inverse-Prandtl of dissipation in standard k-ε turbulence model for predicting flow field of crossflow turbine. Journal of Advanced Research in Fluid Mechanics and Thermal Sciences, 108(1), 1-15. https://doi.org/10.37934/arfmts.108.1.115*

Los resultados del estudio de Akar y Özener (2024) mostraron que ciertas configuraciones de geometría del pistón que promueven movimiento de tumble mejoran significativamente tanto la homogeneidad de la mezcla como la energía cinética turbulenta respecto a la configuración base, mientras que mayores niveles de remolino (swirl) tienden a reducir la homogeneidad bajo las condiciones estudiadas. También los investigadores observaron que un chorro de hidrógeno con mayor momento mejora la mezcla general dentro del cilindro. Estos hallazgos contribuyen a orientar el diseño de movimiento de gases en motores H_2ICE ultra-magros, especialmente cuando se busca retrofitar motores diésel para uso con hidrógeno, identificando qué parámetros de flujo interno son más favorables para lograr mezclas homogéneas y combustiones estables con bajas emisiones.

Gammaidoni et al. (2024) investigaron mediante simulaciones CFD (dinámica de fluidos computacional) el efecto del momento de inicio de inyección (SOI) en un motor de combustión interna de encendido por chispa (spark ignition, SI) alimentado con hidrógeno, comparando estrategias de inyección directa (DI) frente a inyección al puerto (PFI) con mezcla previa. El objetivo fue analizar cómo cambian los campos de mezcla y el comportamiento de la combustión a diferentes relaciones aire-combustible (λ) y tiempos de inyección, para proponer estrategias que mejoren la eficiencia y estabilidad de la combustión en motores de hidrógeno.

Los resultados obtenidos por Gammaidoni et al. (2024) mostraron que, bajo cargas magras (λ = 2 y 3), las estrategias premixed (PFI) obtienen muy alta eficiencia de combustión, mientras que para λ = 3,5 ocurre una combustión parcial con solo ~70 % del hidrógeno oxidado. En los casos con DI el rendimiento de combustión fue inferior al de mezcla previa, pero se observó

una mejora significativa al adelantar el inicio de la inyección hacia el final de la carrera de admisión, lo que además redujo la duración de la etapa inicial de combustión y puede beneficiar la estabilidad de ignición en condiciones muy pobres.

Finalmente, Anticaglia et al. (2023) realizaron un análisis de análisis de viabilidad de un motor de combustión interna alimentado con hidrógeno mediante inyección directa, partiendo de un motor de gasolina turboalimentado de alto desempeño. El estudio se desarrolló como una prueba de concepto numérica, en la cual se adaptaron y evaluaron los principales componentes y parámetros del motor para su operación con hidrógeno, tales como la relación de compresión, el sistema de admisión y escape, la estrategia de inyección y la sobrealimentación. El objetivo principal de los autores fue determinar si este tipo de motor puede alcanzar niveles de potencia, eficiencia y desempeño comparables a los motores convencionales actuales, posicionándose como una alternativa viable a corto plazo dentro del proceso de descarbonización del sector automotriz

Para ello, Anticaglia et al. (2023) emplearon una metodología de simulación de fidelidad múltiple, combinando modelos unidimensionales para el análisis global del motor y modelos tridimensionales de dinámica de fluidos computacional para estudiar en detalle la formación de la mezcla y el proceso de combustión. A través de análisis paramétricos, se evaluaron la influencia de diferentes configuraciones de diseño y condiciones de operación, prestando especial atención al uso de mezclas pobres y al control de las emisiones de óxidos de nitrógeno. Los resultados obtenidos por los investigadores permitieron demostrar que, mediante una adecuada estrategia de inyección directa y un diseño optimizado del motor, es posible lograr altos niveles de eficiencia y un funcionamiento estable, respaldando la viabilidad técnica del concepto propuesto.

JUSTIFICACIÓN

La transición energética constituye uno de los principales desafíos globales actuales, debido al impacto negativo que la contaminación y las emisiones de gases de efecto invernadero han generado sobre el medio ambiente. De acuerdo con las United Nations (s. f.), para el año 2030 es necesario reducir las emisiones de efecto invernadero en un 45%; sin embargo, estiman que, exista un aumento del 10% con respecto al año 2010 debido a los avances actuales de han tenido las naciones.

El sector transporte se identifica como uno de los principales contribuyentes a las emisiones de gases de efecto invernadero, debido al uso predominante de combustibles fósiles derivados de hidrocarburos. Por esta razón, es importante el estudio y la implementación de combustibles alternativos que permitan disminuir dichas emisiones y contribuir al cumplimiento de las metas establecidas en el Acuerdo de París. En este sentido, el hidrógeno se perfila como una de las alternativas más viables para la descarbonización del sector energético, dado que su uso no genera emisiones directas de dióxido de carbono. Para el caso colombiano, la WWF Colombia (s. f.) estima que el hidrógeno de bajas emisiones represente aproximadamente el 2% del consumo final de energía en el año 2030 y alcance cerca del 17% para el año 2050.

En los últimos años, la investigación sobre el uso del hidrógeno como combustible se ha orientado hacia la adaptación de motores de combustión interna convencionales para su operación con hidrógeno, evaluando las limitaciones asociadas a sus propiedades físicas y químicas, tales como su baja densidad volumétrica, su elevada velocidad de llama y la posibilidad de presentar fenómenos de preignición (Khalid et al., 2024). En este contexto, diversos estudios se han enfocado en proponer estrategias que mitiguen estas deficiencias, destacándose la inyección directa como una alternativa para reducir el riesgo de preignición y mejorar el control de la combustión, así como el uso de mezclas hidrógeno–metano con el fin de optimizar el comportamiento del combustible y favorecer su estabilidad.

Por otra parte, las simulaciones numéricas se han consolidado como una herramienta fundamental para analizar de manera detallada los parámetros que influyen en una combustión eficiente y en una inyección adecuada de hidrógeno. Estas permiten estudiar el comportamiento del chorro en función de variables como el ángulo de inclinación y la geometría del inyector, la presión de inyección, los flujos turbulentos y los procesos de mezcla. Aunque la obtención de resultados de alta confiablidad implica un costo computacional considerable, es posible implementar configuraciones numéricas optimizadas que equilibren precisión y rendimiento, facilitando la evaluación los de parámetros más adecuados para la inyección.

Por lo tanto, el presente estudio se justifica en la necesidad de contribuir al entendimiento del proceso de inyección y mezcla del hidrógeno en motores de combustión interna mediante el uso de modelos numéricos que permitan evaluar su comportamiento bajo diferentes condiciones operacionales. Este aporte no solo fortalece el conocimiento técnico en el campo de los combustibles alternativos, sino que también respalda el desarrollo de tecnologías más limpias y alineadas con los compromisos de descarbonización del sector transporte.

OBJETIVOS

Objetivo general

Analizar el comportamiento dinámico y la mezcla de un chorro compresible de hidrógeno inyectado en una cámara de volumen constante mediante simulación CFD.

Objetivos específicos

- Definir la estrategia de simulación del proceso de inyección, estableciendo el dominio computacional, los modelos físicos y las condiciones de operación.
- Simular el comportamiento transitorio del chorro de hidrógeno bajo diferentes condiciones de inyección.
- Analizar el desempeño del proceso de inyección a partir de la mezcla, la expansión y la distribución espacial del chorro obtenidas en las simulaciones.

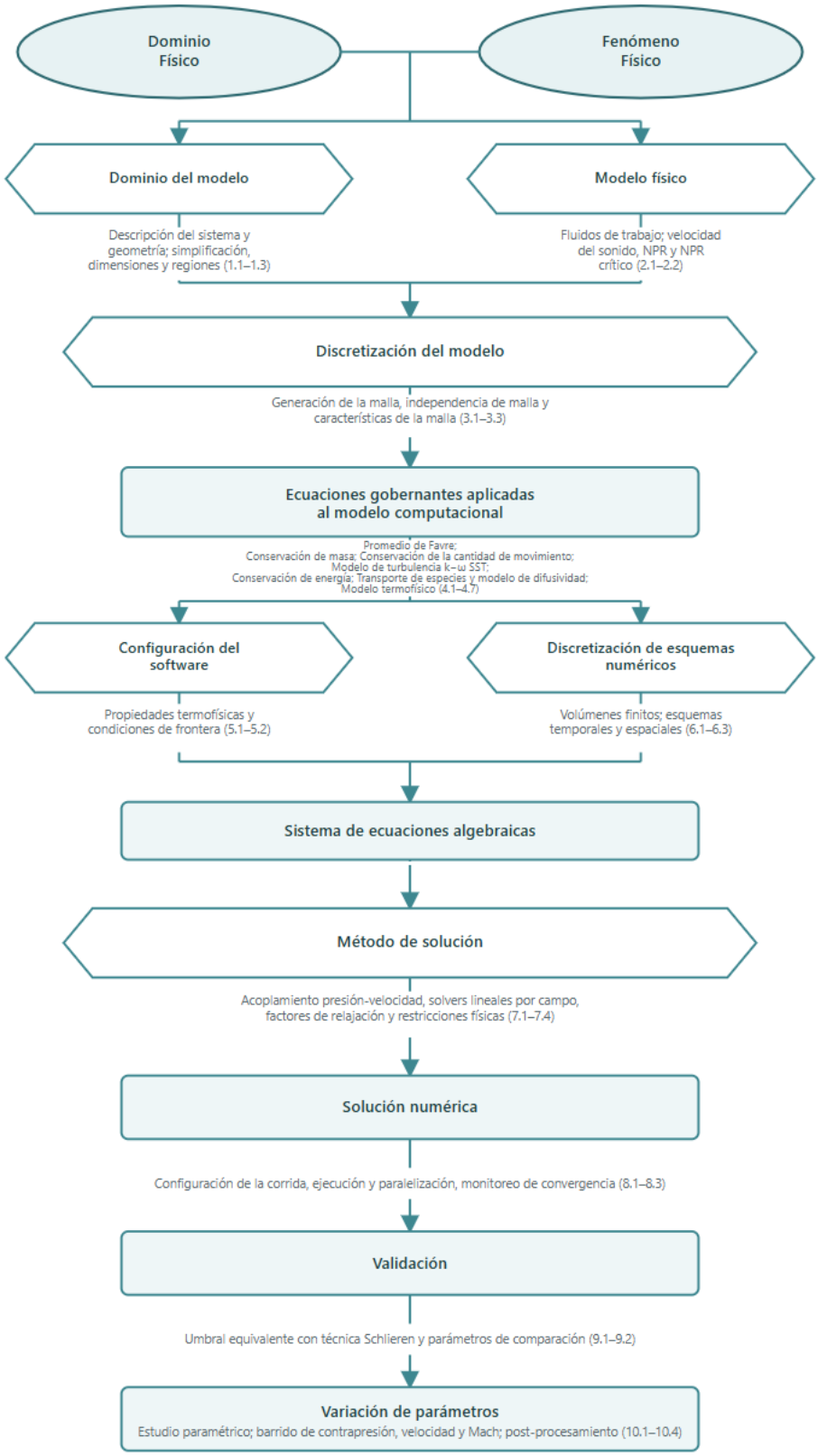
PROCEDIMIENTO METODOLÓGICO

El procedimiento metodológico llevado a cabo en este trabajo de grado se estableción de tal forma que se logre comprender la construcción de la simulación desde la geometría utilizada hasta la forma en que el software OpenFOAM soluciona el problema numéricamente junto con los resultados obtenidos. Este procedimiento se divide en 10 secciones, las cuales se desarrollan de forma clara e integral demostrando el dominio sobre el software. En la figura 9 se describe el paso a paso estructurado para realizar la simulación en CFD.

Este procedimiento medotológica permite conocer la matemática que utiliza el software para obtener resultados confiables a partir de los modelos termofísicos, de conservación de masa, de energía y el turbulento. La mayor parte del procedimiento se centra en la validación de la simulación numérica mediante la comparación de los datos obtenidos numéricamente y los datos experimentales reportados en el artículo de Delbari et al. (2025). Finalmente, en la sección 9, se realizan variaciones en los parámetros operativos para ver la influencia que tiene la velocidad de inyección y la contrapresión en el comportamiento del chorro.

El desarrollo de estas etapas busca no solo la ejecución computacional de la herramienta, sino también contrastar los datos obtenidos en la simulación numérica con los fundamentos teóricos expuestos en las ecuaciones gobernantes. De esta manera, se logra profundizar en la comprensión de la física real del fenómeno, interpretar la evolución del chorro y fundamentar los hallazgos a partir de una comparación rigurosa entre la teoría, el modelo numérico y la evidencia experimental.

Figura 9. *Procedimiento Metodológico de la simulación CFD de inyección directa de hidrógeno en cámara de volumen constante*



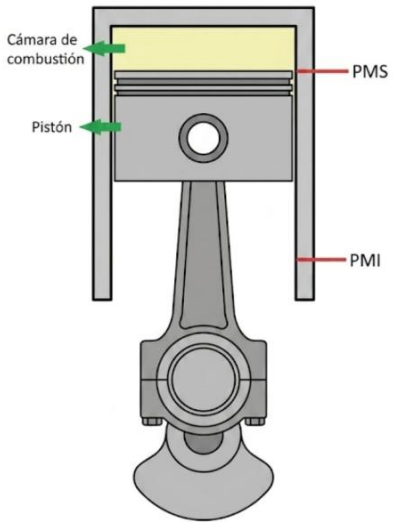
Fuente. Por obtención propia

1.DÓMINIO FÍSICO

1.1 Descripción del sistema físico

El sistema físico analizado corresponde a la inyección directa de hidrógeno gaseoso (H2) a una cámara de combustión de volumen constante. Como se ilustra en la en la figura 10, el estado del dominio se sitúa al finalizar la etapa de compresión, momento en el cual el pistón alcanza el punto muerto superior (PMS) tras desplazarse desde el punto muerto inferior (PMI). En esta condición, el fluido confinado en la cámara se encuentra a la presión y temperatura resultantes del proceso de compresión.

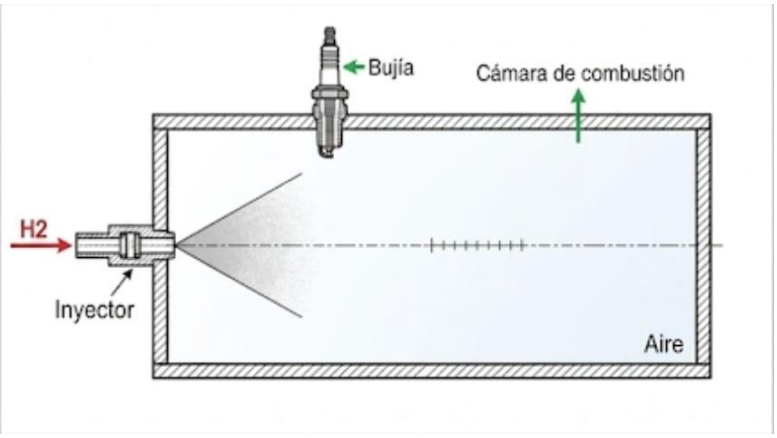
Figura 10. *Esquema del mecanismo pistón-cilindro con la ubicación del punto muerto inferior (PMI) y el pistón posicionado en el punto muerto superior (PMS).*



Fuente. Por obtención propia

La configuración detallada de la cámara de combustión se presenta en la figura 11. El volumen interno se encuentra ocupado inicialmente por aire comprimido. A través de un inyector lateral, se introduce un chorro de H2 a una presión determinada, dando paso al proceso de mezcla entre el hidrógeno y el aire. Posteriormente, esta mezcla es susceptible de ser encendida mediante la bujía ubicada en la parte superior de la cámara.

Figura 11. *Representación esquemática de la cámara de combustión, incluyendo el inyector lateral de H2, el desarrollo del chorro, la bujía de ignición y el medio receptor de aire*



Fuente. Por obtención propia

La finalidad de la simulación es analizar la penetración del chorro y la distribución de la mezcla H2-aire en términos de inflamabilidad. La geometría y condiciones de operación se basaron en el trabajo experimental de Delbari et al. (2025), quienes estudiaron el comportamiento de chorros de H_2 y mezclas H_2-CH_4 bajo diferentes condiciones de presión de inyección y contrapresión mediante técnicas de visualización Schlieren.

1.1.1 Geometría a analizar

Para la simulación, la cámara de combustión se definió como un cilindro con dimensiones de 200 mm de longitud axial y 60 mm de radio, para evitar que el chorro de H2 choque con el dominio computacional en el tiempo de simulación (t=2ms), dado que la penetración máxima reportada por Delbari et al. (2025) es de aproximadamente 102 mm.

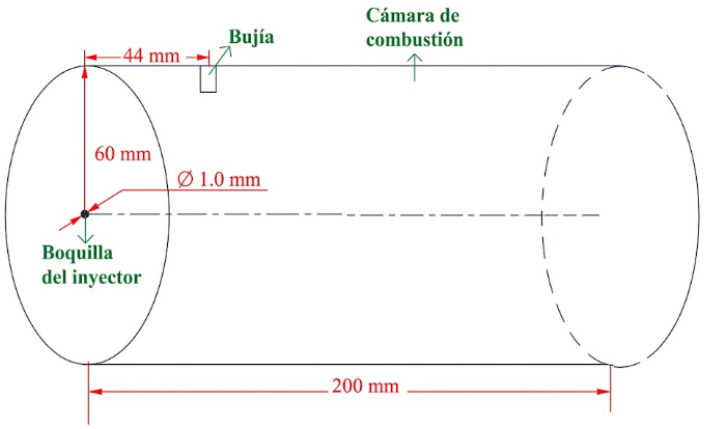
El radio de 60 mm se dimensionó a partir de la tasa de expansión (S) descrita en la Tabla 5.1 del libro de Pope (2000, Cap. 5.1), la cual indica que el radio característico del chorro crece a una tasa del 10% respecto a la distancia recorrida a lo largo de x:

Ecuación 20. Crecimiento del chorro con respecto a la distancia recorrida

$$\frac{dr_{1/2}}{dx} = 0.1$$

La anterior ecuación indica que, si el chorro recorre 200 mm en dirección axial, el radio del chorro sería de 20 mm, valor inferior al radio del dominio (60 mm), asegurando que el chorro se desarrolle libremente sin interactuar con las paredes laterales del dominio. La boquilla del inyector se modeló como si fuera un orificio de diámetro = 1 mm, el cual se ubicó en el extremo izquierdo del dominio (X=0, Y=0) (ver figura 12). La posición de la bujía de ignición reportada en el artículo de referencia corresponde a X=44 mm desde el orificio de inyección, distancia que se tomó como punto de análisis de inflamabilidad en el presente estudio.

Figura 12. *Dimensiones de la cámara de combustión*



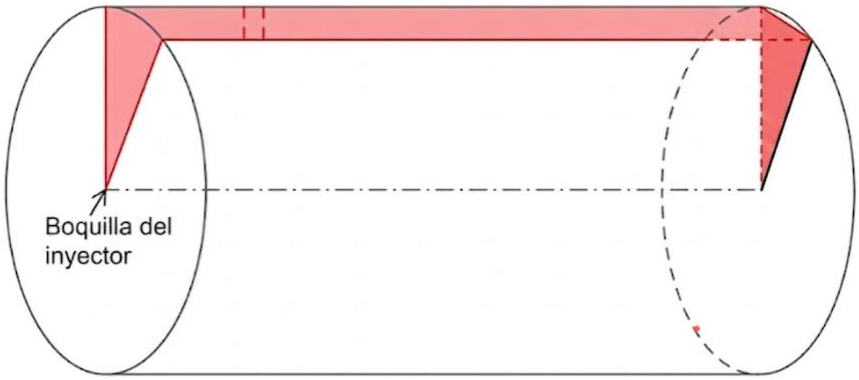
Fuente. Por obtención propia

Una de las caracterizas de este chorro es que presenta una simetría rotacional en el eje axial, por lo que se puede representar en una geometría axisimétrica, la cual se detalla en la sección 1.2.

1.2 Simplificación del dominio

El inyector de H_2 se encuentra alineado con el eje axial de la cámara, con un ángulo de inclinación de 0°, lo que produce un chorro simétrico respecto a dicho eje. Esta condición de simetría rotacional permite simplificar el dominio computacional mediante una geometría 2D axisimétrica. Esta simplificación consiste en modelar una sección angular de 10° del cilindro completo, denominada wedge, asumiendo que el comportamiento del flujo es idéntico en todas las direcciones angulares. En la figura 13, se observa el corte que se le hace a la geometría completa, para obtener la 2D axisimétrica (color rojo).

Figura 13. *Condición axisimétrica vista desde la geometría completa*



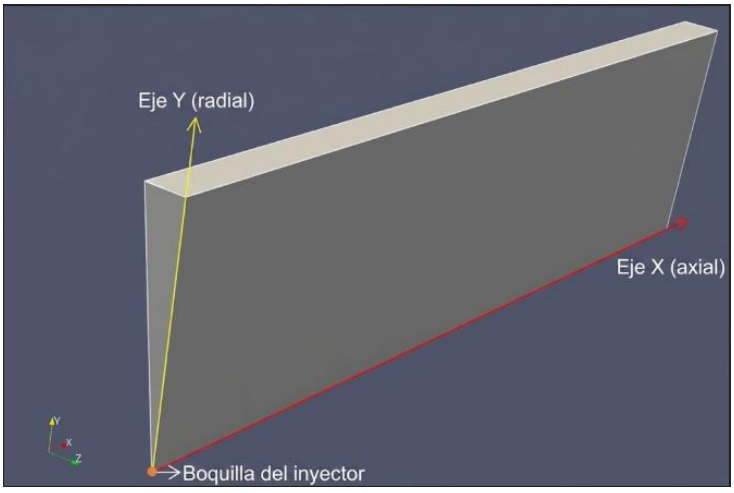
Fuente. Por obtención propia

Esta suposición se justifica con las características geométricas del sistema a modelar, ya que la boquilla es circular de 1 mm de diámetro, el inyector está alineado con el eje axial y las condiciones de entrada son uniformes en toda la sección transversal del orificio. Asimismo, se fundamenta con la teoría de flujos turbulentos libres de Pope (Pope, 2013) la cual establece

que en un chorro circular las propiedades del flujo promediado en el tiempo son invariantes respecto al ángulo azimutal (d/d=0).

De este modo, el campo promediado se comporta de manera estacionaria y axisimétrica, permitiendo describir el flujo en función únicamente de las coordenadas axial (x) y radial (y), ver figura 14. Esta simplificación matemática conserva la precisión física del campo medio del chorro mientras optimiza el costo computacional para lograr un mayor refinamiento de malla en la capa de mezcla.

Figura 14. *Geometría 2D axisimétrica*



Fuente. Por obtención propia

Las dimensiones del dominio computacional se definieron de la siguiente manera: una longitud axial de 200 mm, un sector wedge de 10° y un radio de 60 mm. Ver figura 15.

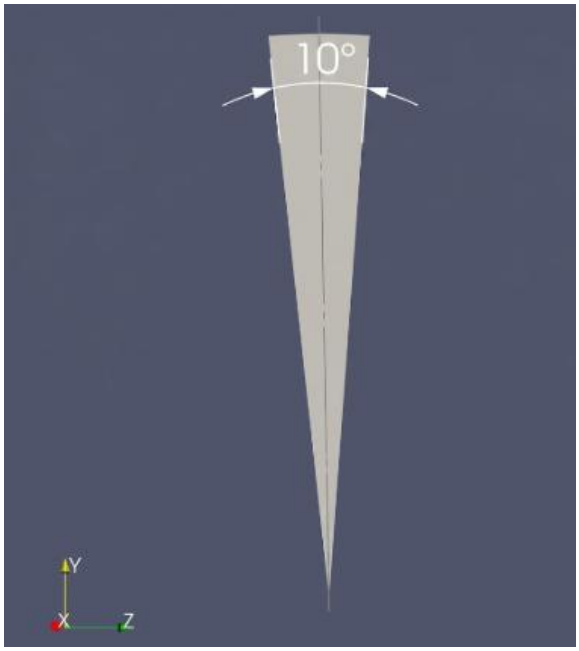
Figura 15. *Dimensiones axial y radial*



Fuente. Por obtención propia

El sector angular se estableció en 10° (±5° respecto al plano X-Y), valor recomendado por la documentación de OpenFOAM para geometrías axisimétricas tipo wedge, siendo suficientemente pequeño para mantener la aproximación 2D axisimétrica y evitar inconsistencias numéricas en el solver. Ver figura 16.

Figura 16. *Sección angular wedge.*



Fuente. Por obtención propia

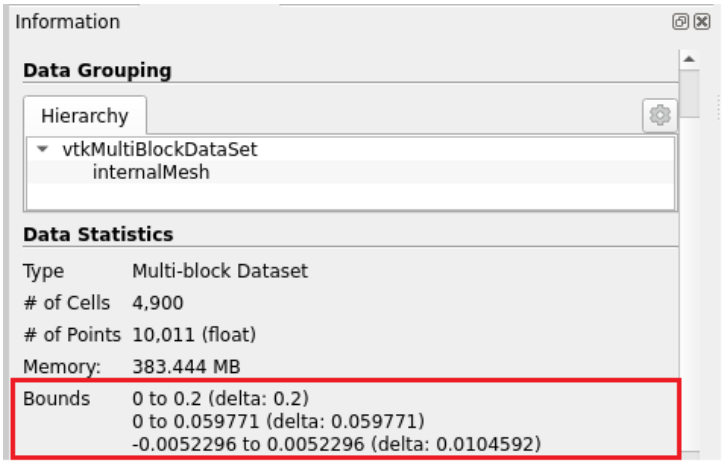
1.3 Dimensiones y regiones del dominio

En las secciones anteriores se describió la geometría empleada para la simulación. En este apartado se detallan las dimensiones del dominio computacional, su definición en OpenFOAM y su visualización en ParaView. Asimismo, se describen las regiones de frontera (*boundary patches*), cuya definición es fundamental para el análisis físico de los resultados.

1.3.1 Dimensiones

Al inspeccionar la geometría en ParaView, las dimensiones del dominio se representan mediante una caja delimitadora (*Bounds*) expresada en coordenadas cartesianas (X, Y, Z) y en unidades del Sistema Internacional (metros), en lugar de mostrar directamente los parámetros polares del sector circular (Figura 17).

Figura 17. *Dimensiones de la geometría en Paraview*

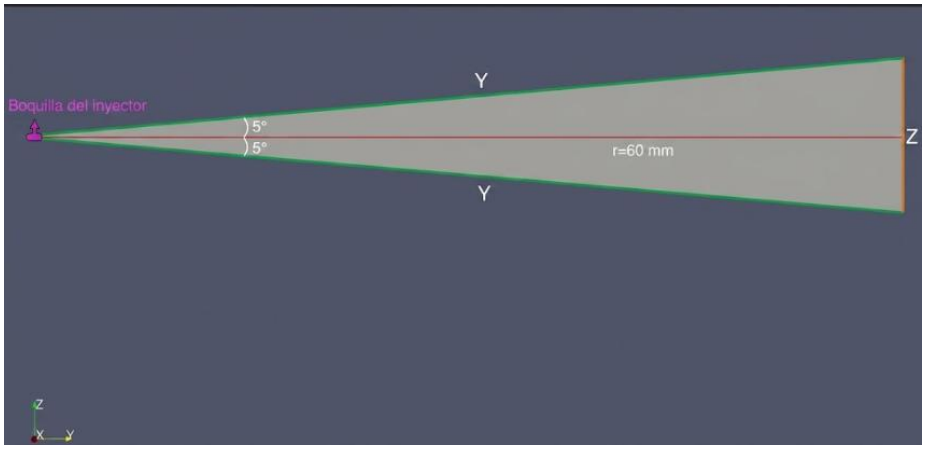


Fuente. Por obtención propia

En primer lugar, se tiene un bound para X (dirección axial): 0m a 0,2m (delta: 0,2), es decir va de 0 mm a 200 mm. Seguido a esto, se tiene un bound para Y (proyección radial): 0m a 0.059771m (delta: 0.059771). Por último, el bound de Z (extensión azimutal): –0.0052296m a 0.0052296m (delta: 0.0104592).

Debido a la implementación de una geometría 2D axisimétrica de tipo *wedge* con una apertura angular total de 10°, los valores en los ejes Y y Z corresponden a la proyección trigonométrica del radio (60 mm) dividida simétricamente en dos semiángulos de respecto al plano central (Figura 18).

Figura 18. *División simétrica de semiángulos para cálculo de dimensiones Y y Z*



Fuente. Por obtención propia

Como se puede observar en la parte inferior izquierda de la figura 18 el eje horizontal es Y, el vertical es Z. Para hallar Y se debe usar la siguiente expresión:

Ecuación 21. Distancia Y con trigonometría

$$Y = r \cdot cos\theta$$

Donde r es 60 mm (el radio de la geometría) y es 5°, por ende, Y es:

$$Y = 60 \cdot \cos(5°) = 59.771\, mm$$

Al comparar este resultado con la figura 5 se puede confirmar que Y va de 0 m a 0.059771 m = 59.771 mm.

Para el eje en Z, en la figura 5 dice que bound de –0.0052296 m a 0.0052296 m (delta: 0.0104592. Aplicando la trigonometría se tiene lo siguiente:

Ecuación 22. Distancia Z con trigonometría

$$Z = r \cdot sen\theta$$

Donde r es 60 mm (el radio de la geometría) y es 5°, por ende, Z es:

$$Z = 60 \cdot sen(5°) = 5.2296\, mm$$

Como se observa en la figura 14, Z tiene una parte positiva y la otra negativa por lo que los valores de Z coinciden con los vistos en Paraview –0.0052296 m a 0.0052296 m = -5.2296 mm a 5.2296 mm.

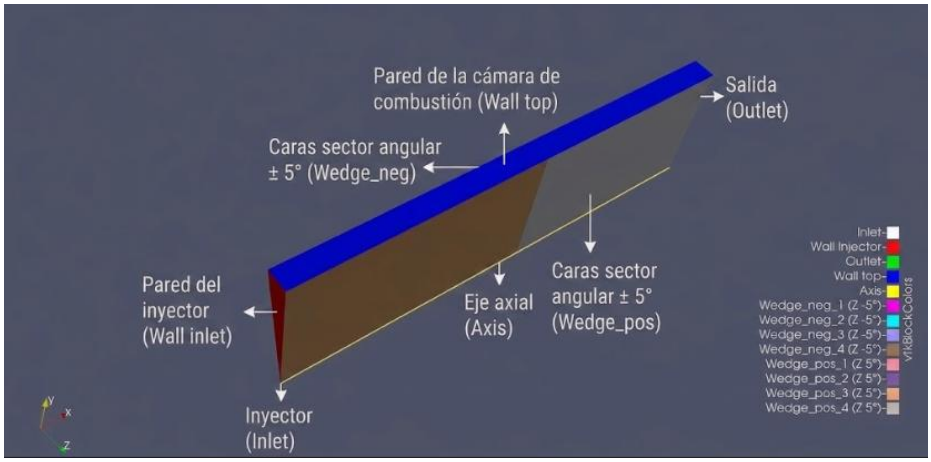
1.3.2 Regiones del dominio

En OpenFOAM, las fronteras del dominio computacional se clasifican según su tipo geométrico (*patch type*). Esta clasificación define el comportamiento matemático de cada contorno y es fundamental para imponer correctamente las condiciones de frontera en la simulación:

- **Patch:** Es una frontera abierta genérica que permite la entrada o salida de flujos (*inlet* y *outlet*).
- **Wall:** Pared sólida que representa superficies físicas e impone condiciones de contorno como el no deslizamiento (*wall_injector* y *wall_top*).
- **Wedge:** Caras laterales del sector angular que imponen simetría rotacional en modelos axisimétricos (*wedge_pos* y *wedge_neg*).
- **Empty:** Frontera sin resolución de ecuaciones en la dirección normal; utilizada para representar el eje central de simetría (*axis*) o planos 2D.

La geometría se divide en 6 principales regiones que son útiles para la generación de la malla que se explicará en la sección 3. Este dominio computacional está compuesto por las siguientes regiones de frontera: Inyector (*Inlet),* la pared del inyector *(Wall injector),* ssalida (Outlet), pared lateral de la cámara de combustión *(Wall top),* eje de simetría axial *(Axis),* caras del sector angular ±5° *(Wedge_ pos* y *Wedge_neg).* En la figura 19, se presenta la geometría junto con el listado de regiones.

Figura 19. *Regiones de la geometría.*



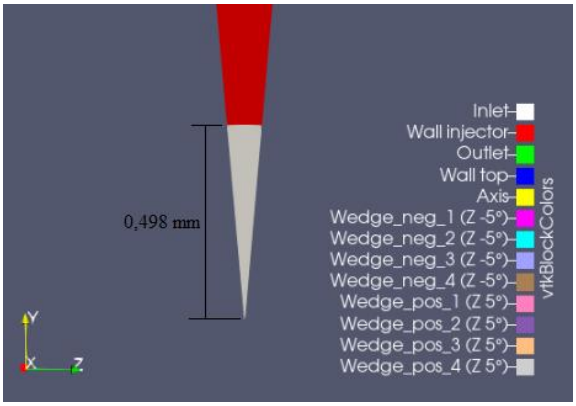
Fuente. Por obtención propia

El *Inlet* (color blanco), representa el orificio de inyección de H_2, definido como frontera tipo patch, la cual tiene un radio de 0.498mm, correspondiente a la proyección trigonométrica del radio real de la boquilla (0.5mm) sobre el eje Y.

$$Y = 0{,}5 \cdot \cos(5°) = 0{,}498\, mm$$

En la figura 20 se observa un acercamiento de la pared del inyector, enfocando la región del inyector.

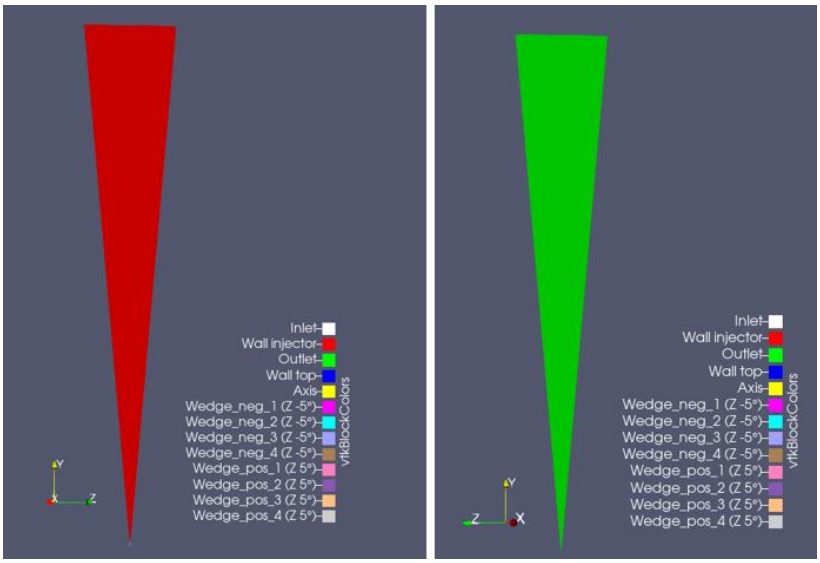
Figura 20. *Región del inyector (Inlet)*



Fuente. Por obtención propia

La segunda región es *Wall injector* (color rojo), corresponde a la pared de la boquilla del inyector, definida como frontera tipo wall. Seguido a este se encuentra el *Outlet* (color verde) que es frontera tipo patch ubicada en X=200mm, correspondiente a la salida del dominio donde se impone la contrapresión de la cámara de combustión, ver figura 1.12. El *Wall top* (color azul) es una frontera tipo wall ubicada en Y=59.771mm que representa la pared lateral de la cámara de combustión, la cual limita el dominio en dirección radial ver en la figura 19.

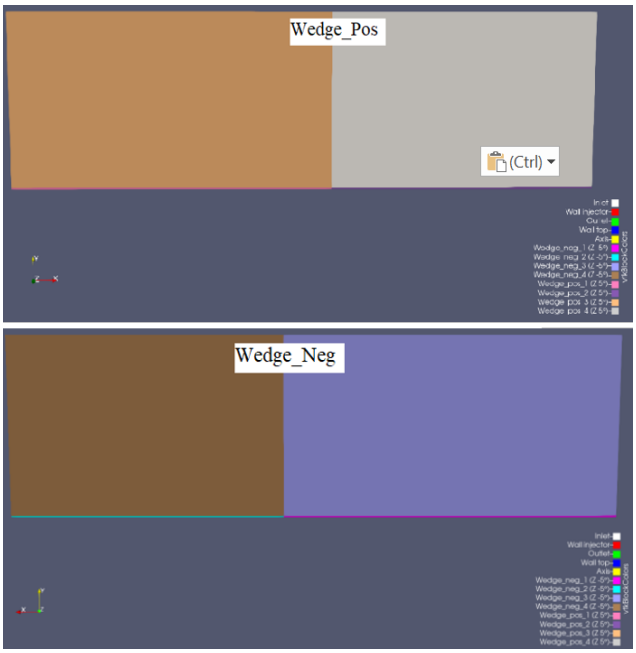
Figura 21. *Región de Wall injector y región Outlet*



Fuente. Por obtención propia

El *axis* (color amarillo), una frontera tipo empty ubicada en Y=0 que corresponde al eje de simetría axial del dominio, que se puede observar en la figura 19. Los *Wedge positivos* y *negativos* que son fronteras tipo wedge que corresponden a las caras frontal (+5°) y posterior (-5°) del sector angular de 10°. OpenFOAM aplica automáticamente la condición de simetría rotacional entre estas dos caras, garantizando que el campo de flujo sea equivalente en ambas superficies. Ver figura 22.

Figura 22. *Regiones del Wedge_Pos y Wedge_Neg*



Fuente. Por obtención propia

En la tabla 1 se encuentra un resumen de las regiones de la geometría, en donde se puede observar el color que cada una de ellas tiene, su tipo en OpenFOAM, su ubicación y su función física dentro de la simulación.

Tabla 1. *Regiones del dominio en OpenFOAM.*

Región	Color	Tipo OpenFOAM	Ubicación	Función física
Inlet	Blanco	patch	X=0, Y=0 a 0,498mm	Orificio de inyección de H_2
Wall injector	Rojo	wall	X=0, Y=0,498 a 59,771mm	Pared de la boquilla
Outlet	Verde	patch	X=200mm, Y=0,498 a 59,771mm	Salida/contrapresión
Wall top	Azul	wall	X=0 a 200 mm, Y=59,771mm	Pared lateral cámara
Axis	Amarillo	empty	X=0 a 200mm, Y=0	Eje de simetría axial
Wedge pos	Rosado, Morado, Naranja y Gris	wedge	+5° del plano	Cara frontal sector angular
Wedge neg	Fucsia, Cian, Lila y Cafe	wedge	-5° del plano	Cara posterior sector angular

Fuente. Por obtención propia

2. MODELO FÍSICO

En esta sección se describen los fluidos de trabajo involucrados en la simulación, junto con sus propiedades termofísicas, las condiciones de frontera impuestas en cada región del dominio y los parámetros de operación de cada caso simulado. Asimismo, se definen las variables adimensionales que caracterizan el comportamiento del chorro y sustentan la comparación con los resultados experimentales de Delbari et al. (2025).

2.1 Fluidos de trabajo

El estudio contempla la interacción no reactiva entre dos especies gaseosas: hidrógeno (H2) como fluido inyectado y aire como medio receptor en la cámara de combustión. Ambos gases se modelan bajo la ecuación de estado de gas ideal. La evolución del proceso de mezcla se monitorea a través de la fracción másica (Yi) de cada componente; por lo que, en el estado inicial (t = 0s), el dominio establece una condición de Y_H2 = 1 (Y_aire=0) en la frontera del inyector y Y_aire=1 (Y_H2 = 0) en el interior de la cámara.

Las propiedades termofísicas de ambas especies (extraídas de Çengel, Tabla A-2) se detallan en la tabla 2.

Tabla 2. *Propiedades termofísicas de las especies*

Propiedad	Hidrógeno (H2)	Aire
Masa molar [kg/kmol]	2.016	28.97
Capacidad calorífica a presión constante (Cp) [kJ/(kg·K)]	14.307	1.005
Capacidad calorífica a volumen constante (Cv) [kJ/(kg·K)]	10.183	0.718
Constante de gases específica (Ri)[kJ/(kg·K)]	4.1240	0.2870
Coeficiente adiabático (γ)	1.405	1.40

Fuente. Por obtención propia

Las diferencias en las propiedades de cada fluido inducen fenómenos de alta compresibilidad, rápida difusividad y cizallamiento en la capa de mezcla del chorro. Asimismo, el seguimiento espacio-temporal de la fracción másica permite delimitar la región de mezcla comprendida entre los límites de inflamabilidad del hidrógeno: 4% al 75% en volumen, equivalente a 0,29% al 17,3% en fracción másica. (Ring et al., 2011)

2.2 Parámetros de simulación

Los parámetros de operación se obtuvieron del trabajo experimental de Delbari et al. (2025), quienes estudiaron la inyección de H_2 bajo diferentes presiones de inyección y contrapresiones. Para el presente estudio se seleccionaron dos casos caracterizados por contrapresiones; caso1: 0 kPa(g) (101,325 Pa absolutos) y caso 2: 150 kPa(g) (251,325 Pa absolutos).

2.2.1 Cálculo de la velocidad del sonido

Uno de los parámetros que expone Delbari et al. (2025) es la velocidad del sonido con la que se realiza la inyección del hidrógeno. Esta velocidad se calcula con la ecuación 23, en donde esta depende de la relación de calores específicos del H2, la constante del gas del hidrógeno y la temperatura del medio, que para este caso es de 300 K.

Ecuación 23. Velocidad del sonido para el H2

$$Ue = \sqrt{\gamma \cdot R_{H_2} \cdot T}$$

Reemplazando los valores se tiene que la velocidad del sonido del hidrógeno a T=300 K es:

$$Ue = \sqrt{1.405 \cdot 4124 \frac{J}{kgK} \cdot 300K} = 1314.5 \frac{m}{s}$$

2.2.2 Cálculo del NPR y el NPR crítico

El *Nozzle Pressure Ratio (NPR)* es la relación entre la presión de inyección (Pinj) y la presión dentro de la cámara de combustión o la contrapresión (Pb). El NPR define el régimen de expansión del gas a la salida de la boquilla, la cual se calcula con la ecuación 4.

Para que el fluido se encuentre en condición de flujo estrangulado, el NPR debe ser mayor o igual al NPR crítico, condición en la cual la velocidad en la garganta de la boquilla alcanza la velocidad del sonido (M=1) y el gasto másico es máximo e independiente de la presión aguas abajo (Çengel & Boles, 2015, Cap. 17). El NPR crítico se determina a partir del coeficiente adiabático específico del gas, como se observa en la ecuación 24:

Ecuación 24. NPR crítico

$$NPR_{critico} = \left(\frac{\gamma + 1}{2}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}}$$

Reemplazando por la relación de calores específicos del H2, el NPR crítico es:

$$NPR_{critico_{H2}} = \left(\frac{1.405 + 1}{2}\right)^{\frac{1.405}{1.405 - 1}} = 1{,}896$$

2.2.3 Parámetros establecidos

Como se mencionó anteriormente se van a realizar dos simulaciones con contrapresiones (Pb) diferentes. En ambos casos, la inyección se realiza a una temperatura nominal de 300 K y a la velocidad del sonido del hidrógeno (1314.5 m/s) correspondiente a Mach M = 1 en la salida del inyector.

La relación de presión en la boquilla NPR para el caso 1, se calcula con una presión de inyección (Pinj) de 800 kPa(g), donde su presión absoluta es de 779,186 Pa y una contrapresión (Pb) de 101,305 Pa. El NPR es:

$$NPR_{caso1} = \frac{779{,}186}{101{,}305} = 7.69$$

La relación de presión en la boquilla NPR para el caso 2, se calcula con una presión de inyección (Pinj) de 800 kPa(g), donde su presión absoluta es de 779,186 Pa y una contrapresión (Pb) de 251,325 Pa. El NPR es:

$$NPR_{caso2} = \frac{779{,}186}{251{,}325} = 3.10$$

Con lo anterior se muestra que el NPR de los 2 casos a estudiar superan el NPR crítico para el H2 (NPR crítico = 1,896) produciendo que el flujo se encuentre en condición de flujo estrangulado. Los parámetros de operación adoptados se sintetizan en la tabla 3.

Tabla 3. *Parámetros de simulación*

Parámetro	Caso 1	Caso 2	Unidad
Presión de inyección (Pinj)	779,186	779,186	Pa
Contrapresión (Pb)	101,325	251,325	Pa
Velocidad de inyección (Ue)	1314.5	1314.5	m/s
Temperatura (T)	300	300	K
Relación de presión (NPR)	7.69	3.10	-
Tiempo de simulación	2	2	ms

Fuente. Por obtención propia

3.DISCRETIZACIÓN DEL MODELO

En esta sección se describe el proceso de construcción de la malla para la geometría presentada en la sección 1.3, sus consideraciones físicas y el estudio de independencia de malla realizado para garantizar la confiabilidad de los resultados de las simulaciones CFD. Asimismo, se presenta la configuración del software OpenFOAM utilizada para la generación de la malla, los parámetros de refinamiento adoptados y las métricas de calidad obtenidas mediante la herramienta *checkMesh.*

3.1 Generación de la malla

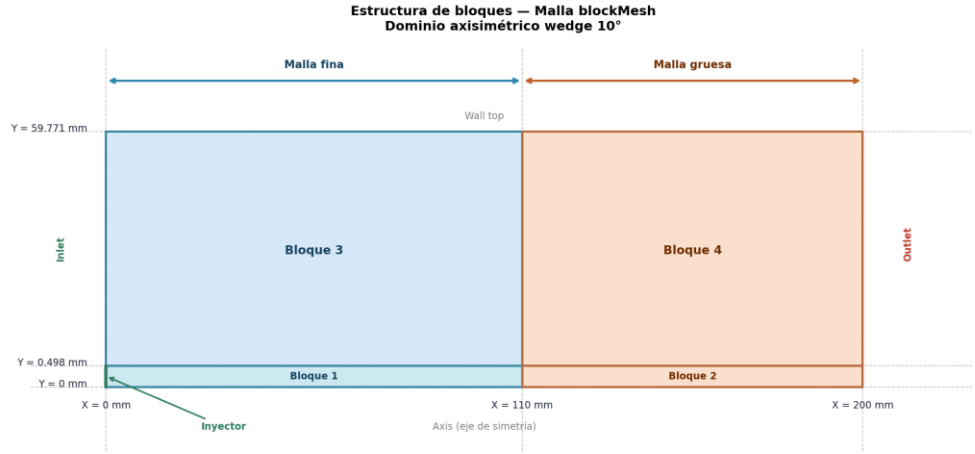
La malla del dominio computacional se generó mediante la herramienta *blockMesh* de OpenFOAM 12, la cual permite estructurar el espacio mediante bloques hexaédricos definidos por sus vértices, número de divisiones por eje y factores de expansión o refinamiento gradual (*grading*).

Para optimizar el balance entre la precisión del modelo y el costo computacional, el dominio axisimétrico tipo wedge se dividió en 4 bloques principales, estructurados en dos regiones de resolución espacial, como se ve en la figura 23.

- Bloque 1: tiene dimensiones de X= 0mm a X=110mm, Y=0 a Y= 0.498mm, esta zona corresponde a la región de la boquilla del inyector, donde se originan los gradientes más intensos del chorro de presión, densidad y velocidad.
- Bloque 2: sus dimensiones son de X=110mm a X=200mm, Y=0 a Y= 0.498mm, en esta región el chorro ya se ha desarrollado parcialmente y los gradientes son menores.
- Bloque 3: esta sección va de X= 0mm a X=110mm, Y=0.498mm a Y= 59.771mm, este bloque captura el desarrollo radial del chorro y su mezcla con el aire.
- Bloque 4: las dimensiones son de X=110mm a X=200mm, Y=0.498mm a Y= 59.771mm, en esta zona los gradientes se atenúan progresivamente debido a la mezcla con el aire.

Las regiones de mayor interés físico corresponden a los bloques 1 y 3 (malla fina), mientras que los bloques 2 y 4 se definen con menor densidad de celdas (malla gruesa) para reducir el costo computacional.

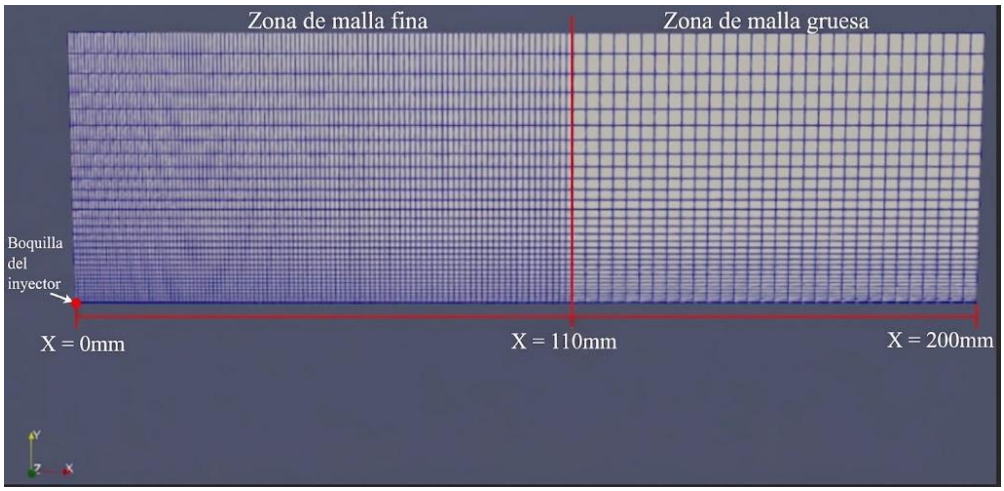
Figura 23. *División de la malla*



Fuente. Por obtención propia

En la figura 24, se muestra la geometría con la malla generada en ella se evidencia la diferencia entre la malla fina y la malla gruesa.

Figura 24. *División de la malla*



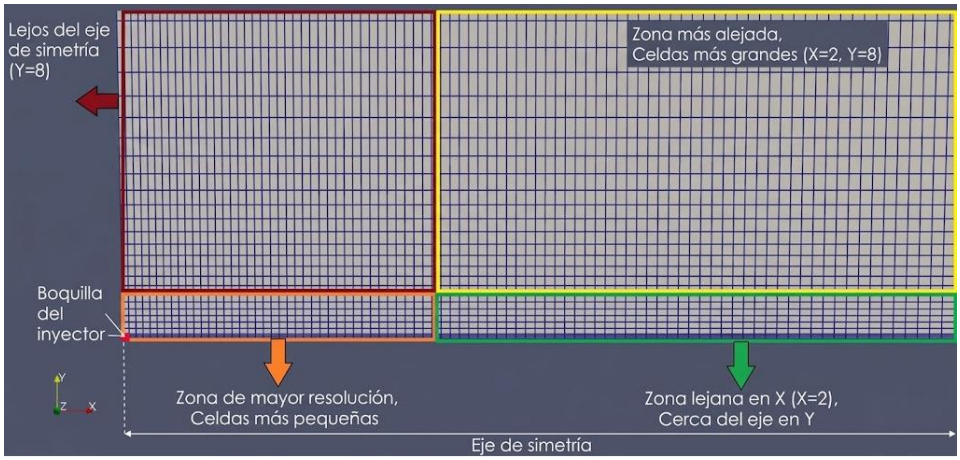
Fuente. Por obtención propia

El dominio se definió con un factor de escala de *convertToMeters 0.001* para convertir la geometría de milímetros a metros. Asimismo, se aplicó un factor de refinamiento (*grading*) de X = 2 en la dirección axial y Y = 8 en la dirección radial. Esta distribución hiperbólica de celdas se seleccionó por las siguientes razones físicas y numéricas:

- **Refinamiento radial (Y = 8):** Aglomera la mayor cantidad de celdas sobre el eje de simetría y en la capa de mezcla del chorro, donde la transferencia de momento y masa entre el hidrógeno y el aire genera grandes gradientes transversales. Hacia el límite exterior del dominio, las celdas se ensanchan al tratarse de una zona con flujo cuasiestático.
- **Refinamiento axial (X = 2):** Concentra la densidad de celdas en la boquilla, permitiendo capturar el fenómeno de expansión inicial del gas, y ayuda a realizar una transición suave

en el tamaño de celda a medida que el flujo avanza en sentido axial, evitando errores de interpolación por saltos abruptos de volumen.

Figura 25. *Refinamiento de la malla en el dominio*



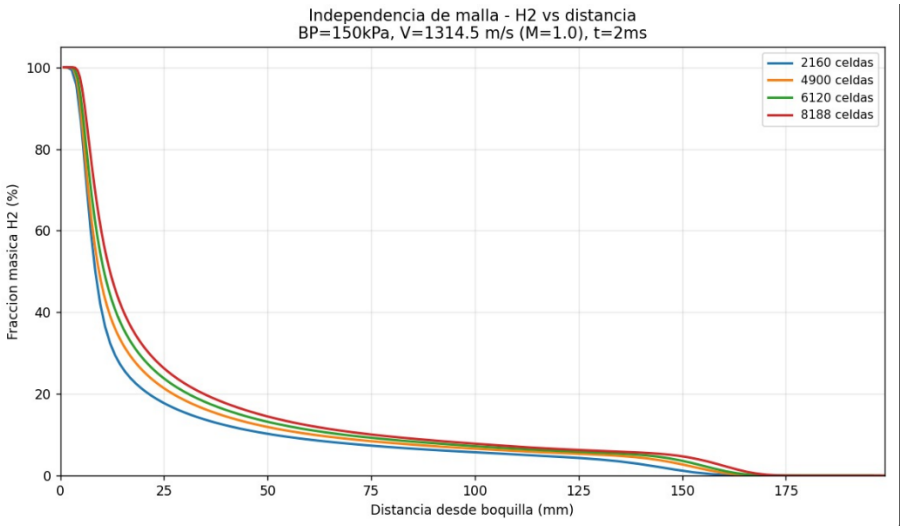
Fuente. Por obtención propia

3.2 Independencia de malla

Se verificó que la solución fuera independiente de la densidad de malla, requisito fundamental para asegurar que los resultados obedecen a la física del fenómeno y no a la resolución del mallado. Para ello se evaluaron cuatro niveles de refinamiento, con 2160, 4900, 6120 y 8188 celdas, bajo condiciones de operación idénticas: contrapresión de 150 kPa, número de Mach M=1, velocidad de 1314.5 m/s, presión de inyección de 800 kPa(g) y temperatura de 300 K. Los casos fueron distribuidos entre los integrantes del grupo de investigación para su ejecución simultánea.

El criterio de selección consistió en identificar la malla a partir de la cual un mayor refinamiento no produce variaciones apreciables en las variables de interés, en particular la fracción másica de hidrógeno y la penetración del chorro. Este procedimiento es consistente con el reportado en estudios de inyección directa de hidrógeno, en los que se ha mostrado que una malla más fina mejora la resolución de la penetración y la difusión del chorro a costa de un mayor tiempo de cálculo, mientras que una malla gruesa incrementa la difusión numérica y degrada la precisión (Barbato y Cantore, 2021; Babayev et al., 2021). La malla definitiva se fijó como el punto de equilibrio entre precisión y costo computacional.

Figura 26. *Refinamiento de la malla en el dominio*



Fuente. Por obtención propia

Con base en la figura 26, se seleccionó la malla de 4,900 celdas como la malla definitiva para todas las simulaciones del presente trabajo. Esta selección permite optimizar el costo computacional manteniendo la fidelidad de los resultados.

3.3 Características de la malla

CheckMesh es una herramienta de OpenFOAM que permite la verificación del estado de la malla para garantizar la consistencia de las celdas y las métricas de calidad, con la finalidad de evitar errores numéricos o geométricos que comprometan la estabilidad de la simulación. Esta herramienta proporciona información sobre la conexión entre fronteras, la no ortogonalidad, la relación de aspecto, la asimetría y las métricas topológicas de la geometría.

- **La conectividad entre fronteras**: verifica los vectores normales de las caras, asegurando que no haya discontinuidades entre las celdas, asigna parches de frontera consistentes, dando la validación para un dominio axisimétrico.
- **La no ortogonalidad de celdas (*Non-orthogonality*):** Mide el ángulo formado entre el vector que une los centros de dos celdas adyacentes y el vector normal a la cara compartida. Cuando el valor es de 0° la malla es ortogonal, por lo que, a mayor ángulo, mayor es la difusividad numérica introducida en los resultados.
- **La relación de aspecto (*Aspect ratio*):** Es la relación entre el lado mayor con el lado menor, donde se mide la proporción que hay entre ellos, considerando el grading propuesto en la dirección axial y radial, evaluando que no se presenten saltos abruptos que afecten la interpolación entre celdas.
- **La asimetría (*Skewness*):** Mide la distancia entre el centro de la cara de una celda y la línea que interseca con la siguiente celda, lo que garantiza la calidad de la malla.
- **Las métricas topológicas de la geometría:** Muestra la cantidad de nodos, caras y celdas hexaédricas tiene la malla, asegurándose de que no haya celdas con volúmenes negativos.

En la tabla 4 se presentan las características de la malla seleccionada en la sección anterior, con la cual se realizan las simulaciones.

Tabla 4. *Características de la malla*

Métricas	Valor
N° de celdas	4900
Hexaedros	4760
Prismas	140
Aspect ratio máximo	60.228
Skewness máximo	0.323
No ortogonalidad máx.	0°
Volumen mínimo (m^3)	6.02e-13
Volumen máximo (m^3)	1.4e-7
Volumen total (m^3)	6.25e-5

Fuente. Por obtención propia

4. ECUACIONES GOBERNANTES

La simulación numérica de la inyección de H2 involucra un fenómeno termo fluidodinámico caracterizado por un flujo compresible, sónico (estrangulado), turbulento y multiespecie. En consecuencia, la descripción matemática del proceso se rige por las ecuaciones fundamentales de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía.

Este sistema se complementa con las ecuaciones de Navier-Stokes instantáneas (conservación de masa, cantidad de movimiento, energía y especie), sobre las cuales se aplica el Promediado de Favre (Favre-RANS) para tratar la turbulencia compresible, permitiendo describir con precisión la física del flujo y garantizar el modelo numérico.

4.1 Promedio de Favre

Cuando se presentan simulaciones con flujos compresibles se debe utilizar el promedio de Favre, ya que este calcula de una manera más simple las fluctuaciones turbulentas que hacen que la densidad del fluido sea variable (CFD Online, s.f.). Para esto utiliza un promedio ponderado por densidad de Favre:

Ecuación 25. Promedio ponderado por densidad

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}}$$

Donde $\tilde{\phi}$ es el valor medio de Favre, $\overline{\rho\phi}$ es el promedio de Reynods convencional del producto de la densidad del flujo por una variable instantánea, y $\overline{\rho}$ es el promedio de Reynods de la densidad. La descomposición de Favre se realiza con la ecuación 4.2:

Ecuación 26. Descomposición de Favre

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi''$$

Donde ϕ es una variable instantánea, $\tilde{\phi}$ es el valor medio de Favre de dicha variable y ϕ'' son las fluctuaciones turbulentas con respecto al promedio de Favre. Una propiedad fundamental de esta descomposición es que el promedio de Reynolds de las fluctuaciones ponderadas por la densidad es nulo:

Ecuación 27. Promedio de Reynolds en el promedio de Favre

$$\overline{\rho\phi''} = 0$$

Esta propiedad es la que permite eliminar las correlaciones explícitas entre la densidad y las fluctuaciones de velocidad ($\overline{\rho' u'}$), simplificando significativamente las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos compresibles.

4.2. Conservación de masa

La conservación de masa dentro de la simulación se basa en la ecuación de continuidad que permite mantener la masa del fluido dentro del volumen de control a lo largo del tiempo.

Ecuación 28. Conservación de masa en un volumen de control

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

Donde, ρ es la densidad local del fluido ($kg/m3$), t es el tiempo (s), ∇ es el operador de divergencia y u es el vector de velocidad (m/s).

Al aplicar el promedio de Favre se debe sustituir ρ por su promedio $\overline{\rho}$ y u por $\tilde{u} + u''$:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\rho \tilde{u}} + \overline{\rho u''}\right) = 0$$

Por la definición del promediado de Favre, el término fluctuante ponderado por la densidad es idénticamente nulo ($\overline{\rho u''} = 0$) . De esta forma, la ecuación de continuidad promediada para un flujo transitorio y compresible conserva su forma analítica exacta sin términos fluctuantes adicionales:

Ecuación 29. Promedio de Favre de conservación de masa

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\rho \tilde{u}}\right) = 0$$

Donde $\overline{\rho}$ es la densidad promediada del fluido ($\mathrm{kg/m^3}$) y $\tilde{u}$ es el vector de velocidad promediado de Favre (m/s). Debido a que la inyección ocurre a alta presión con estructuras de choque y ondas de expansión, el término transitorio $\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} \neq 0$ captura la variación temporal de la densidad.

4.3. Conservación de la cantidad de movimiento

Teniendo como base la segunda ley de Newton en flujos transitorios la tasa de cantidad de movimiento de una partícula de fluido es igual a la suma de todas las fuerzas externas que

actúan sobre ella. Al aplicar la conservación de cantidad de movimiento para el tipo de flujo del presente trabajo, se hace uso de las ecuaciones de Navier-Stokes:

Ecuación 30. Conservación de cantidad de movimiento de Navier-Stokes

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u u) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + S_M$$

Donde, ρu es la densidad de cantidad de movimiento del fluido ($kg/(m2 \cdot s)$), uu es el tensor del vector de velocidad, p es la presión estática local (Pa), τ es el tensor de esfuerzos viscosos (Pa) y SM representan las fuerzas externas.

Debido a que el H2 y el aire se consideran como fluidos newtonianos, el tensor de esfuerzos viscosos se calcula bajo la hipótesis de Stokes, donde τ se relaciona con la tasa de deformación del fluido mediante:

Ecuación 31. Tensor de esfuerzos viscosos

$$\tau = \mu \left[\nabla u + (\nabla u)^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot u) I \right]$$

Donde μ es la viscosidad dinámica *(*cuya dependencia con la temperatura T se calcula mediante la Ley de Sutherland descrita en la Sección 4.6*)* y el término $-\frac{2}{3}(\nabla \cdot u) I$ representa la corrección por compresibilidad. Al aplicar el promedio de Favre, aparece una nueva variable que es el tensor de esfuerzos de Reynolds (τ_{Rey}), por ende, la ecuación de cantidad de movimiento queda:

Ecuación 32. Promedio de Favre de conservación de cantidad de movimiento

$$\frac{\partial \overline{\rho}\, \tilde{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho}\, \tilde{u}\, \tilde{u}) = -\nabla \overline{p} + \nabla \cdot \left(\overline{\tau} + \tau_{Rey} \right) + S_M$$

Donde $\overline{p}$ es la presión estática promediada (Pa), SM representa fuerzas externas (despreciables en este caso) y $\overline{\tau}$ es el promedio de tensor de esfuerzos viscosos moleculares para un fluido newtoniano bajo la hipótesis de Stokes:

Ecuación 33. Promedio tensor de esfuerzos viscosos

$$\overline{\tau} = \mu \left[\nabla \tilde{u} + (\nabla \tilde{u})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \tilde{u}) I \right]$$

El tensor de esfuerzos de Reynolds viene dado por $\tau_{Rey} = \overline{-\rho u'' u''}$, y se modela mediante la hipótesis de viscosidad turbulenta de Boussinesq:

Ecuación 34. Tensor de esfuerzos de Reynolds hipótesis de Boussinesq

$$\tau_{Rey} = \mu_t \left[\nabla \tilde{u} + (\nabla \tilde{u})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \tilde{u})I\right] - \frac{2}{3}\overline{\rho}kI$$

Donde μ_t es la viscosidad dinámica turbulenta $(Pa \cdot s)$ calculada mediante el modelo de turbulencia $k - \omega$ SST, y k es la energía cinética turbulenta, las cuales se explicarán en la siguiente sección.

4.4 Modelo de turbulencia $k - \omega$ SST

Para modelar la turbulencia en el chorro de hidrógeno se empleó el enfoque RANS, el cual resuelve las variables promedio del flujo. Además de esto, la decisión de utilizar un modelo de turbulencia de k−ω SST desarrollad por Menter (1994), el cual combina la precisión del modelo cerca de las paredes y en las capas de la mezcla junto con el modelo que es preciso en el centro del chorro.

Este modelo de turbulencia calcula la conservación de energía cinética k y la tasa de disipación específica. En la ecuación 4.11 se muestra la función de la energía cinética k promediada por Favre:

Ecuación 35. Ecuación de transporte para k

$$\frac{\partial(\overline{\rho}k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho}\,\tilde{u}k) = \widetilde{P_k} - \beta^*\,\overline{\rho}k\omega + \nabla \cdot [(\mu + \sigma_k\mu_t)\nabla k]$$

Donde $\widetilde{P_k}$ es el término de producción de energía cinética turbulenta debido al gradiente de velocidad medio, β^* = 0.09 y σ_k es la constante de difusión efectiva interpolada por la función F1, que actúa como conmutador que toma el valor de 1 cerca de las paredes (modelo de turbulencia $k - \omega$) y 0 en el flujo continuo (modelo de turbulencia $k - \epsilon$).

Ecuación 36. Función F1

$$F_1 = \tanh(arg_1^4)$$

La tasa de disipación específica se calcula mediante la siguiente ecuación:

Ecuación 37. Ecuación de transporte para *ω*

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho}\,\tilde{u}\omega) = \alpha\left(\frac{\overline{\rho}}{\mu_t}\right)\widetilde{P_k} - \beta\overline{\rho}\omega^2 + \nabla \cdot \left((\mu + \sigma_\omega\mu_t)\nabla\omega\right) + 2(1 - F_1)\overline{\rho}\sigma_{\omega 2}\left(\frac{1}{\omega}\right)\nabla k \cdot \nabla\omega$$

La viscosidad turbulenta μ_t se calcula limitando el esfuerzo cortante para evitar sobreestimaciones en zonas de alto cizallamiento:

Ecuación 38. Viscosidad turbulenta

$$\mu_t = \frac{(a_1 \overline{\rho} k)}{\max(a_1 \omega, S \cdot F_2)}$$

Donde a_1=0.31 es una constante del modelo, S es la magnitud de la tasa de deformación y F_2 es la segunda función de mezcla que restringe la limitación del esfuerzo cortante a las capas límite y de mezcla. La viscosidad turbulenta μt obtenida se incorpora directamente en los coeficientes efectivos de las ecuaciones de cantidad de movimiento, energía (k_eff) y transporte de especies (D_eff), las dos últimas se explicarán en la siguiente sección.

4.5. Conservación de energía

Para el flujo desarrollado en la simulación en donde constantemente varían las propiedades termodinámicas con el tiempo, se utiliza la primera ley de la termodinámica expresada en la forma diferencial conservativa en función de la energía total específica:

Ecuación 39. Conservación de energía

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot \big(u(\rho E + p)\big) = \nabla \cdot (k_e ff \nabla T) + \nabla \cdot (\tau \cdot u) + S_E$$

Donde, E energía total específica por unidad de masa (J/kg), T la temperatura absoluta del fluido (K), p es la presión estática local (Pa), k_{eff} es la conductividad térmica efectiva del fluido (W/(m K)), $\tau \cdot u$ representa el trabajo realizado por las fuerzas viscosas de corte y S_E son las fuentes térmicas externas (despreciables en este estudio).

Se aplica la descomposición de Favre a la entalpía ($h = \tilde{h} + h''$) y a la velocidad ($\boldsymbol{u} = \tilde{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{u''}$), mientras que la densidad y la presión se promedian mediante Reynolds ($\rho = \overline{\rho} + \rho'$, $p = \overline{p} + p'$). Al aplicar el promedio de Favre a la Ecuación 4.15, surge el flujo turbulento de calor ($\overline{\rho \boldsymbol{u''} \boldsymbol{h''}}$):

Ecuación 40. Promedio de Favre de la conservación de la energía

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\,\tilde{h})}{\partial t} + \nabla\cdot(\overline{\rho}\,\tilde{u}\tilde{h}) + \frac{\partial(\overline{\rho}\,\widetilde{K})}{\partial t} + \nabla\cdot(\overline{\rho}\,\tilde{u}\widetilde{K}) - \frac{\partial\overline{p}}{\partial t} = \nabla\cdot\left(\overline{k\nabla T} - \overline{\rho u'' h''}\right) + \nabla\cdot(\overline{\tau\cdot u}) + S_h$$

Donde $\widetilde{K} = \frac{1}{2}|\tilde{\boldsymbol{u}}|^2$ es la energía cinética del flujo medio. Para el término del flujo turbulento de calor, se aplica la hipótesis de gradiente de Boussinesq mediante el Número de Prandtl Turbulento (Prt):

Ecuación 41. Flujo turbulento de calor

$$-\overline{\rho\boldsymbol{u}''\boldsymbol{h}''} = \frac{\mu_t}{Pr_t}\nabla\tilde{h}$$

Para las simulaciones tipo RANS, la transferencia de calor aumenta debido a los remolinos generados, por lo que la conductividad térmica efectiva se calcula como:

Ecuación 42. Conductividad térmica efectiva

$$k_{\text{eff}} = k + \frac{\overline{\rho}\,C_p\nu_t}{Pr_t}$$

donde k es la conductividad molecular del gas, Cp es la capacidad calorífica a presión constante, vt es la viscosidad cinemática turbulenta y Prt es el número de Prandtl turbulento ($\Pr t \approx 0.85$).

OpenFOAM utiliza polinomios Janaf para dar solución a las variaciones temperatura experimentadas en la expansión supersónica y las estructuras de choque. Para realizar el balance de energía, usando coeficientes en los polinomios Janaf para los valores de Cp(T), la entalpída sensible h(T) y la entropía s(T).

Ecuación 43. Capacidad calorífica polinomial JANAF

$$\frac{Cp(T)}{R} = a1 + a2T + a3T^2 + a4T^3 + a5T^4$$

Ecuación 44. Entalpía sensible polinomial JANAF

$$\frac{h(T)}{RT} = a1 + \frac{a2}{2}T + \frac{a3}{3}T^2 + \frac{a4}{4}T^3 + \frac{a5}{5}T^4$$

donde R es la constante específica del gas ((J/(kg K)). Los coeficientes se dividen en dos intervalos de temperatura ajustados mediante una temperatura común de transición (T=1000K) para garantizar la máxima precisión en un rango de 200 K a 5000 K.

La integración de JANAF en la ecuación de conservación de la energía es crítica en la simulación del chorro, ya que actualiza continuamente el coeficiente de expansión adiabática:

Ecuación 45. Coeficiente de expansión adiabática

$$\gamma(T) = \frac{Cp(T)}{Cv(T)}$$

Esto permite determinar con precisión la velocidad local del sonido $a = \sqrt{\gamma RT}$, y predecir correctamente las estructuras de choque características del chorro subexpandido.

En OpenFOAM 12, la ecuación de energía se implementa mediante el modelo hePsiThermo, el cual resuelve el campo de entalpía (h) y actualiza la compresibilidad (ψ = ρ/p) en cada paso de tiempo. Dado que no existen reacciones químicas en el presente estudio, se utiliza la entalpía sensible (sensibleEnthalpy) como variable energética, excluyendo la entalpía de formación de cada especie. Esta aproximación es válida para procesos de mezcla puramente física sin combustión.

4.6. Transporte de especies y modelo de difusividad

En la simulación de la inyección de hidrógeno en un medio receptor (aire), el flujo es multicomponente y no reactivo. Para calcular la evolución espacial y temporal de la mezcla H2-aire, la difusión de masa y la penetración del chorro, se debe resolver la ecuación de conservación para la fracción másica de la especie inyectada, la cual se rige por la ecuación advectivo-difusiva de transporte de especies:

Ecuación 46. Transporte de especies

$$\frac{\partial(\rho Y_{H2})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u Y_{H2}) = \nabla \cdot \left(\rho D_{eff} \nabla Y_{H2}\right) + S_{H2}$$

Donde YH_2 es la fracción másica local de hidrógeno ($0 \leq YH_2 \leq 1$), ρ es la densidad local de la mezcla (kg/m³), u es el vector velocidad (m/s), D_eff es el coeficiente de difusividad efectiva (m^2/s), y S_H_2 es el término fuente químico que en este caso es cero ($S_H_2=0$) dado que el flujo es no reactivo. Además de esto, al ser una mezcla de 2 componentes, no es necesario resolver una ecuación diferencial de fracción másica para el aire, ya que se puede determinar algebraicamente con la conservación de masa:

Ecuación 47. Fracción másica del aire

$$Y_{aire} = 1 - Y_{H2}$$

En un flujo turbulento compresible, la fracción másica se descompone mediante el promedio ponderado por densidad de Favre ($Y_i = \widetilde{Y}_i + Y_i''$). Aplicando esta descomposición y el

promedio de Reynolds a la Ecuación 4.22, se obtiene la ecuación RANS para el transporte de masa de especies:

Ecuación 48. Promedio de Favre del transporte de especies

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\,\widetilde{Y_{H2}})}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\rho}\,\tilde{u}\widetilde{Y_{H2}}\right) = \nabla \cdot \left(\overline{\rho}\,D_{eff}\nabla\widetilde{Y_{H2}} - \overline{\rho u'' Y_{H2}''}\right) + \overline{S}_{H2}$$

El término fluctuante $\overline{-\rho u'' Y_{H2}''}$ representa el flujo turbulento de masa y se modela mediante la hipótesis de gradiente de Boussinesq utilizando el Número de Schmidt Turbulento (Sc_t):

Ecuación 49. Cierre del flujo turbulento de masa

$$-\overline{\rho u'' Y_{H2}''} = (\mu_t / Sc_t)\nabla\widetilde{Y_{H2}} = \overline{\rho} D_t \nabla\widetilde{Y_{H2}}$$

Donde μ_t es la viscosidad dinámica turbulenta $(\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s})$, $D_t = \frac{\nu_t}{Sc_t}$ es la difusividad turbulenta (m^2/s) y Sc_t es el Número de Schmidt Turbulento ($Sc_t = \frac{\nu_t}{D_t}$) surge de la analogía de Reynolds aplicada al transporte de escalares pasivos. Este parámetro adimensional relaciona la difusividad turbulenta de cantidad de movimiento (ν_t), provista por el modelo de turbulencia, con la difusividad turbulenta de masa (D_t). Dado que los mismos remolinos y vórtices turbulentos son los encargados de transportar tanto el momento como la masa de hidrógeno en el chorro, Sc_t cuantifica la eficiencia relativa entre ambos mecanismos de mezcla.

Agrupando los términos difusivos, la difusividad efectiva de masa se define como:

Ecuación 50. Coeficiente de difusividad efectiva

$$D_{\text{eff}} = D_m + D_t = D_m + \frac{\nu_t}{Sc_t}$$

En OpenFOAM 12 la viscosidad dinámica de cada especie se calcula mediante la Ley de Sutherland para poder evaluar de forma continua la viscosidad dinámica molecular (μ) de cada especie en función de la temperatura local T.

Ecuación 51. Ley de Sutherland

$$\mu(T) = As\frac{T^{3/2}}{T + Ts}$$

En términos de valores de referencia ($T_0,\ \mu_0$), la ley de Sutherland es:

Ecuación 52. Ley de Sutherland en forma de referencia

$$\mu(T) = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \left(\frac{T_0 + S}{T + S}\right)$$

Donde, μ(T) es la viscosidad dinámica de la especie a la temperatura absoluta T (Pa·s), As es el coeficiente de Sutherland ($kg/\left(m \cdot s \cdot K^{\frac{1}{2}}\right)$), Ts (o S) es la constante de Sutherland (K) relacionada con la energía de atracción intermolecular, y T_0 y μ_0 son la temperatura y viscosidad de referencia estándar (T_0=273.15K). Los valores de los parámetros de Sutherland utilizados por OpenFOAM 12 para cada especie son: para el hidrógeno (H_2), As = 6.32×10^{-7} $kg/\left(m \cdot s \cdot K^{\frac{1}{2}}\right)$ y Ts = 72.0 K; mientras que, para el aire, As = 1.458×10^{-6} $kg/\left(m \cdot s \cdot K^{\frac{1}{2}}\right)$ y Ts = 110.4 K.

4.7 Modelo termofísico

Para gestionar el comportamiento de la mezcla gaseosa no reactiva (H2 y aire) en OpenFOAM 12, se empleó el modelo termofísico multicomponentMixture. Este modelo evalúa la evolución espacial y temporal del fluido calculando las propiedades globales de la mezcla en cada volumen de control y paso de tiempo mediante la ponderación por fracción másica de las propiedades individuales de cada especie constituida:

Ecuación 53. Ponderación de propiedades de la mezcla

$$\phi_{\text{mezcla}} = \sum_{i=1}^{N} Y_i \phi_i = Y_{\text{H2}} \phi_{\text{H2}} + Y_{\text{aire}} \phi_{\text{aire}}$$

Donde la constante específica de la mezcla gaseosa resulta de:

Ecuación 54. Constante específica de la mezcla

$$R_{\text{mezcla}} = Y_{\text{H2}} R_{\text{H2}} + Y_{\text{aire}} R_{\text{aire}}$$

representa cualquier propiedad termodinámica o de transporte de la mezcla (como la capacidad calorífica Cp, la entalpía h, la constante específica del gas R o la viscosidad dinámica), Yi corresponde a la fracción másica local de la especie i, y es la propiedad individual de dicha especie evaluada a la temperatura instantánea del medio.

A partir de esta ponderación, la densidad local de la mezcla compresible (ρ) se actualiza en cada paso numérico mediante la Ecuación de Estado de los Gases Ideales:

Ecuación 55. Estado de los Gases Ideales

$$\rho = \frac{p}{R_{mezcla} \cdot T}$$

De esta forma, el solver captura con precisión las variaciones locales de densidad no solo debido a los gradientes térmicos y de presión inducidos por la expansión sónica.

5. Configuración del software

5.1 Propiedades termofísicas

Las propiedades termofísicas se definen en OpenFOAM en el archivo de *physicalProperties*, en el cual se obtienen del *thermoType.* En la Figura 12 se presenta la configuración utilizada para la simulación, cuyos parámetros se describen a continuación (OpenCFD, s.f.-b):

- **Type, hePsiThermo:** Esta función permite calcular el modelo termofísico a partir de la entalpía (h) y la compresibilidad ($\psi = \frac{\rho}{p}$) .
- **Mixture, multicomponentMixture:** Ejecuta la mezcla de los fluidos seleccionados, actualizando las propiedades de la mezcla H2-aire según las fracciones másicas de cada especie.
- **Transport, sutherland:** Este modelo aplica la Ley de Sutherland para calcular la variación de la viscosidad dinámica en función de la temperatura.
- **Thermo, janaf:** Calcula las propiedades termodinámicas mediante polinomios ajustados a datos experimentales de la base de datos JANAF.
- **Energy, sensibleEnthalpy:** Usa la entalpía sensible para resolver las ecuaciones de la conservación de energía.
- **EquationOfState, perfectGas:** Utiliza las ecuaciones de los gases ideales, que asume que el H2 y el aire se comportan como un gas ideal.
- **Specie, specie:** Define las propiedades moleculares de cada especie como la masa molar (M) y la constante individual del gas (R).

Figura 27. *Configuración de propiedades termofísicas*

physicalProperties: Bloc de notas

Archivo Edición Formato Ver Ayuda

```
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       dictionary;
    object      physicalProperties;
}
thermoType
{
    type            hePsiThermo;
    mixture         multicomponentMixture;
    transport       sutherland;
    thermo          janaf;
    energy          sensibleEnthalpy;
    equationOfState perfectGas;
    specie          specie;
}
defaultSpecie Air;
#include "thermo.compressibleGas"
```

Fuente. Por obtención propia

5.2 Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera se explican con respecto a las regiones presentadas en la sección 1.3.2., en donde la programación del software para cada una de ellas se realiza bajo comandos que permiten relacionar su comportamiento dependiendo de la velocidad (U_e), temperatura (T), presión (P), fracciones másicas ($Y_{H2},\ Y_{aire}$) y las de turbulencia ($k,\ \omega$). Se usan estas variables, ya que el software las usa como variables principales para poder calcular otras secundarias como la densidad, entalpía, entre otras. Las condiciones de frontera usadas son:

5.2.1 Condiciones Dirichlet Impuestas

- **fixedValue:** Esta condición de frontera tipo Dirichlet que permite fijar un único valor numérico en la región deseada, es decir, que el solver no puede recalcular dicho valor. Esto se define bajo un valor nominal (), que define el dato numérico que se impone, y un valor de referencia (), el cual es tomado por los modelos matemáticos para solucionar el sistema. A partir de la siguiente ecuación se muestra por qué esta función fija un valor exacto: (OpenCFD, 2022).

- **uniformFixedValue:** Es una condición similar a la anterior, sin embargo, el valor numérico va a cambiar con respecto a una función temporal, es decir, que es una variable que cambia con el tiempo. (OpenCFD, 2022).

5.2.2 Condiciones Neumann y de Flujo Abierto

- **zeroGradient:** La condición de frontera se basa en la condición de Neumann homogénea ($\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$), que permite que las regiones adopten los valores internos de la cámara y que estos no se escapen, esto es gracias a que la tasa de cambio de la variable en la dirección normal sea cero. (OpenCFD, 2022).

- **inletOutlet:** Es una condición de frontera que determina su comportamiento a partir de la dirección del movimiento del flujo, esto es para evitar que la simulación se desestabilice en caso de que la mezcla intente devolverse. (OpenCFD, 2022).

- **pressureInletOutletVelocity:** Esta condición permite calcular el cambio de la velocidad a partir de los campos de presiones, para mantener el equilibrio dentro del sistema. Se utiliza cuando la presión es constante, pero se permite que los vectores de velocidad cambien. (OpenCFD, 2022).

5.2.3 Condiciones de Pared Sólida

- **noSlip:** Es la condición de contorno que fija el valor de velocidad de cero en las paredes, con la finalidad de que esta no se desplace en las fronteras. Su ecuación presenta una velocidad en el límite (OpenCFD, 2022).

5.2.4 Condiciones Geométricas y de Simetría

- **empty:** Es una condición de frontera que se presenta en 2D, utilizada en el eje de simetría axial (r=0), indica que no existe resolución en esa dirección. (OpenCFD, 2022).

- **wedge:** Es una condición que se usa cuando la geometría es 2D axisimétrica. Donde acopla las dos caras del sector angular garantizando continuidad del campo de flujo. (OpenCFD, 2022).

5.2.5 Funciones de Pared para Turbulencia ($k-\omega$ SST)

- **kqRWallFunction:** Condición de frontera aplicada a la energía cinética turbulenta (K) en modelos RANS como $k-\omega$ SST (el modelo seleccionado para esta simulación). Esta función reduce el costo computacional al modelar la capa límite mediante ecuaciones analíticas de pared, lo que evita resolver numéricamente la subcapa límite viscosa y permite emplear mallas más gruesas cerca de las superficies sólidas. (OpenCFD, 2022).

- **omegaWallFunction:** Condición de frontera aplicada a la tasa específica de disipación turbulenta (ω) en paredes sólidas. Evita que esta variable tienda matemáticamente al infinito en la superficie sólida (lo que causaría un error en la simulación) asignando un valor numéricamente estable en las celdas adyacentes a la pared. (OpenCFD, 2022).

La configuración del software para todas las regiones y las variables principales se presenta en la siguiente tabla:

Tabla 5. *Configuración de las condiciones de frontera en OpenFOAM*

Frontera / Región	Presión (P)	Velocidad (U)	Temperatura (T)	Fracción másica H2 (Y_H2)	Fracción másica aire (Y_aire)	Energía cinética turbulenta (K)	Tasa de disipación (ω)
Inlet	fixedValue	uniformFixedValue	fixedValue	fixedValue	fixedValue	fixedValue	fixedValue
Wall injector	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient
Outlet	inletOutlet	pressureInletOutletVelocity	inletOutlet	inletOutlet	inletOutlet	inletOutlet	inletOutlet
Wall top	zeroGradient	noSlip	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient	kqRWallFunction	omegaWallFunction
Axis	empty	empty	empty	empty	empty	empty	empty
Wedge pos	wedge	wedge	wedge	wedge	wedge	wedge	wedge
Wedge neg	wedge	wedge	wedge	wedge	wedge	wedge	wedge

Fuente. Por obtención propia

6. Discretización de esquemas numéricos

Las ecuaciones de conservación establecidas en la sección anterior constituyen un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales acopladas y no lineales que, salvo en casos idealizados, carecen de solución analítica. Su resolución requiere transformarlas en un conjunto de ecuaciones algebraicas equivalentes, tarea que en OpenFOAM se lleva a cabo mediante el método de volúmenes finitos (MVF). El presente apartado describe las ecuaciones base sobre las que opera dicho método, la forma en que cada término se discretiza en el interior del solver y la configuración de los esquemas adoptada en el diccionario fvSchemes.

6.1. Método de volúmenes finitos

Todas las ecuaciones de transporte resueltas (continuidad, cantidad de movimiento, energía, transporte de especies y variables de turbulencia) pueden expresarse bajo una forma general común. Para una propiedad genérica φ transportada por el flujo, dicha forma conservativa se escribe como:

Ecuación 56. Ecuación general de transporte

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U\varphi) = \nabla \cdot (\rho\Gamma\varphi\nabla\varphi) + S\varphi(\varphi)$$

donde ρ es la densidad, U el vector velocidad, Γ_φ el coeficiente de difusión de la propiedad y S_φ su término fuente. Los cuatro términos representan, en orden, la variación temporal, el transporte convectivo, el transporte difusivo y la generación o destrucción de φ. Las ecuaciones gobernantes de la Sección 3 se recuperan como casos particulares de la Ecuación 56: al hacer φ = 1 se obtiene la continuidad, con φ = U la cantidad de movimiento, y con φ igual a la fracción másica de hidrógeno el transporte de especies, cuyo término difusivo obedece a la ley de Fick (Versteeg y Malalasekera, 2007).

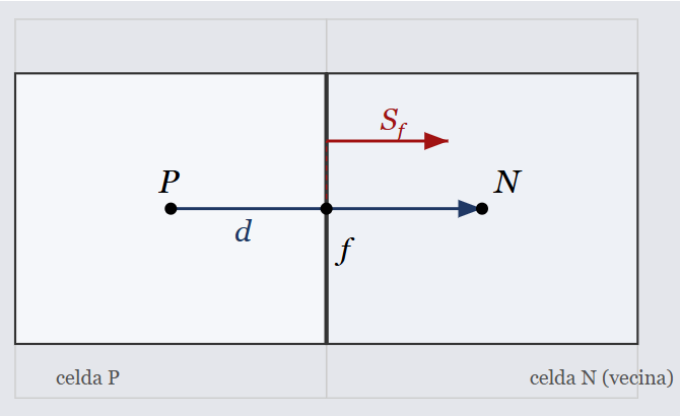
El MVF integra la Ecuación 56 sobre cada volumen de control V_P de la malla. Los términos convectivo y difusivo, que contienen una divergencia, se transforman en integrales de superficie mediante el teorema de Gauss, y estas a su vez en sumatorias sobre las caras de la celda. La forma semidiscreta resultante es:

Ecuación 57. Transporte sobre cada volumen de control

$$\int V(\partial(\rho\varphi)/\partial t)dV + \sum fF\varphi f = \sum f(\rho\Gamma\varphi)f(\nabla\varphi)f \cdot Sf + S\varphi VP$$

donde el subíndice f denota evaluación en la cara de la celda, S_f es el vector de área de dicha cara y $F = (\rho U)_f \cdot S_f$ el flujo másico que la atraviesa. Esta expresión pone de manifiesto el rasgo esencial del método: los balances se plantean en términos de flujos a través de las caras, lo que garantiza la conservación de las magnitudes a nivel discreto. El paso siguiente consiste en aproximar cada término mediante un esquema numérico concreto.

Figura 28. *Volumen de control del método de volúmenes finitos: celda P, celda vecina N, cara compartida f, vector de área S_f y vector de distancia d*



Fuente. Por obtención propia con base en Jasak (1996).

6.2. Esquemas temporales

El término temporal, especificado en ddtSchemes, se discretizó con un esquema implícito de primer orden de tipo Euler. Denotando con el superíndice *n* el instante actual y con *o* el instante anterior, la derivada temporal se aproxima como:

Ecuación 58. Esquema temporal tipo Euler

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \approx \frac{[(\rho P\varphi P)n-(\rho P\varphi P)o]}{\Delta t}$$

El carácter implícito del esquema, que evalúa los términos convectivo y difusivo en el instante *n*, confiere estabilidad incondicional y un comportamiento acotado, propiedades indispensables ante el paso de tiempo reducido y los transitorios abruptos del arranque de la inyección. Aunque introduce más difusión numérica que un esquema de segundo orden, esta se consideró un compromiso aceptable frente al riesgo de oscilaciones en un flujo compresible de alta velocidad. El régimen del cálculo es, en consecuencia, transitorio, coherente con el objetivo de describir la evolución del chorro en el tiempo.

6.3. Esquemas espaciales

La evaluación de las sumatorias de la Ecuación 57 exige conocer el valor de las magnitudes en las caras de la celda, que no coinciden con los centros donde se almacena la solución. El término convectivo (divSchemes) se trató con un esquema *upwind*, que asigna a la cara el valor de la celda situada aguas arriba según el sentido del flujo:

Ecuación 59. Dirección del flujo

$$\varphi f = \varphi P si F \geq 0; \varphi f = \varphi N si F < 0$$

Esta elección acota la solución y evita oscilaciones no físicas en las regiones de fuerte gradiente propias del chorro subexpandido, a costa de una difusión numérica que se juzgó admisible por la robustez que aporta. El gradiente (gradSchemes) se calculó con el esquema de Gauss e interpolación lineal, que reconstruye el gradiente en el centro de la celda a partir de los valores en las caras:

Ecuación 60. Gradiente con Gauss

$$(\nabla\varphi)P = \left(\frac{1}{VP}\right)\sum fSf\varphi f(\nabla\varphi)P = \left(\frac{1}{VP}\right)\sum fSf\varphi f$$

El término difusivo o laplaciano (laplacianSchemes) requiere el gradiente normal en la cara. Su componente ortogonal se aproxima con los valores de las celdas adyacentes y se añade una corrección para la parte no ortogonal (snGradSchemes):

Ecuación 61. Término difusivo con corrección no ortogonal

$$(\nabla\varphi)f \cdot Sf \approx |Sf|(\varphi N - \varphi P)/|d| + \text{corrección no ortogonal}$$

donde $|d|$ es la distancia entre los centros de las celdas P y N. La corrección no ortogonal resulta indispensable en este trabajo, ya que la discretización del dominio en forma de cuña de 5° introduce no ortogonalidad en la vecindad del eje de simetría; sin ella, la precisión de los términos difusivos se degradaría en esa zona. La configuración de estos esquemas en el diccionario fvSchemes se resume a continuación:

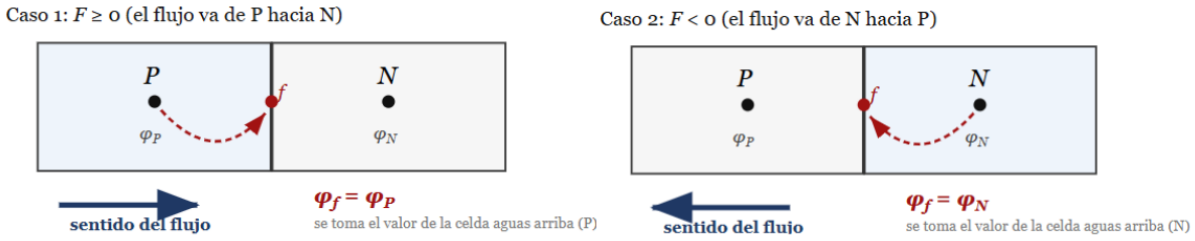
Figura 29.*Sección fvSchemes empleado en las simulaciones*

```
ddtSchemes
{
    default         Euler;
}
gradSchemes
{
    default         Gauss linear;
    grad(U)         Gauss linear;
}
divSchemes
{
    default             none;
    div(phi,U)          Gauss upwind;
    div(phi,Yi_h)       Gauss upwind;
    div(phi,Yi)         Gauss upwind;
    div(phi,H2)         Gauss upwind;
    div(phi,h)          Gauss upwind;
    div(phi,e)          Gauss upwind;
    div(phi,K)          Gauss upwind;
    div(phi,Ek)         Gauss upwind;
    div(phi,k)          Gauss upwind;
    div(phi,omega)      Gauss upwind;
    div(phiv,p)         Gauss upwind;
    div(phid,p)         Gauss upwind;
    div(phi,(p|rho))    Gauss upwind;
    div(phi,hB)         Gauss upwind;
    div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U))))) Gauss linear;
}
laplacianSchemes
{
    default         Gauss linear corrected;
}
interpolationSchemes
{
    default         linear;
}
snGradSchemes
{
    default         corrected;
}
wallDist
{
    method          meshWave;
}
```

Fuente. Por obtención propia

En esta configuración, la totalidad de los términos convectivos se trata con el esquema Gauss upwind, conforme al criterio de estabilidad ya expuesto. Las distintas entradas div(phi,...) corresponden a los campos transportados por el solver compresible: la velocidad (U), las especies (Yi, H2, Yi_h), la energía (e, h) con sus términos de energía cinética asociados (K, Ek), las variables de turbulencia (k, omega) y los términos de trabajo de presión característicos del flujo compresible (phiv,p, phid,p, phi,(p|rho)). La única excepción es el término de esfuerzos viscosos, div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U))))), discretizado con Gauss linear por su naturaleza difusiva, en la que un esquema centrado de segundo orden resulta apropiado. Por último, la entrada wallDist con el método meshWave calcula la distancia a la pared que requiere el modelo de turbulencia k-ω SST para su tratamiento cerca de las superficies.

Figura 30.*Interpolación upwind: el valor en la cara f toma el de la celda situada aguas arriba según el sentido del flujo (φ_f = φ_P si F ≥ 0; φ_f = φ_N si F < 0)*



Fuente. Por obtención propia con base en Versteeg y Malalasekera (2007).

6.4. Construcción del sistema de ecuaciones algebraicas

Al sustituir los esquemas anteriores en la Ecuación 57, cada término queda expresado como una combinación lineal de los valores de la variable en la celda considerada y en sus vecinas. Reagrupando dichos coeficientes, se obtiene para cada volumen de control una ecuación algebraica de la forma:

Ecuación 62. Ecuación para cada volumen de control

$$aP\varphi P = \sum NaN\varphi N + bP$$

donde a_P concentra las contribuciones de la propia celda, a_N las de las celdas vecinas y b_P agrupa los términos fuente y las contribuciones del instante anterior. El ensamblaje de la Ecuación 62 sobre la totalidad de las celdas conforma un sistema lineal disperso de la forma [A]{x} = {b}, planteado de manera independiente para cada campo (presión, velocidad, energía, especies y variables de turbulencia). La estructura dispersa de la matriz [A] refleja que cada celda solo se relaciona con sus vecinas inmediatas. Este sistema constituye la entrada directa para la etapa de solución, en la que se define el procedimiento iterativo con que se resuelve en cada paso de tiempo (Sección 8).

7. SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES

Una vez ensamblado el sistema lineal disperso [A]{x} = {b} para cada campo, la etapa de solución consiste en resolverlo de forma iterativa en cada paso de tiempo. Esta tarea la ejecuta la aplicación foamRun con el módulo de solución fluid, destinado al flujo compresible en régimen transitorio (The OpenFOAM Foundation, 2024). El procedimiento comprende el acoplamiento entre presión y velocidad, la elección de un solucionador lineal por cada campo, el control de la convergencia y la imposición de restricciones físicas, aspectos que se definen en el diccionario fvSolution.

7.1. Estrategia de acoplamiento presión-velocidad

En la formulación segregada, cada ecuación de transporte se resuelve de manera secuencial, y no de forma simultánea. Esto plantea una dificultad particular con la presión, que no dispone de una ecuación de transporte propia, sino que debe deducirse a partir de la restricción de continuidad. El punto de partida es la ecuación de cantidad de movimiento en su forma semidiscreta, en la que la contribución de la celda considerada se separa de la de sus vecinas (Ferziger y Perić, 2002):

Ecuación 63. Cantidad de movimiento de las celdas

$$aPUP = H(U) - \nabla p$$

donde a_P es el coeficiente diagonal de la celda y $H(U)$ agrupa las contribuciones de las celdas vecinas y los términos fuente, excluida la presión. Despejando U_P e imponiendo la conservación de masa ($\nabla \cdot U = 0$ en el límite incompresible, o su equivalente compresible), se obtiene una ecuación de tipo Poisson para la presión:

Ecuación 64. Ecuación Poisson para la presión

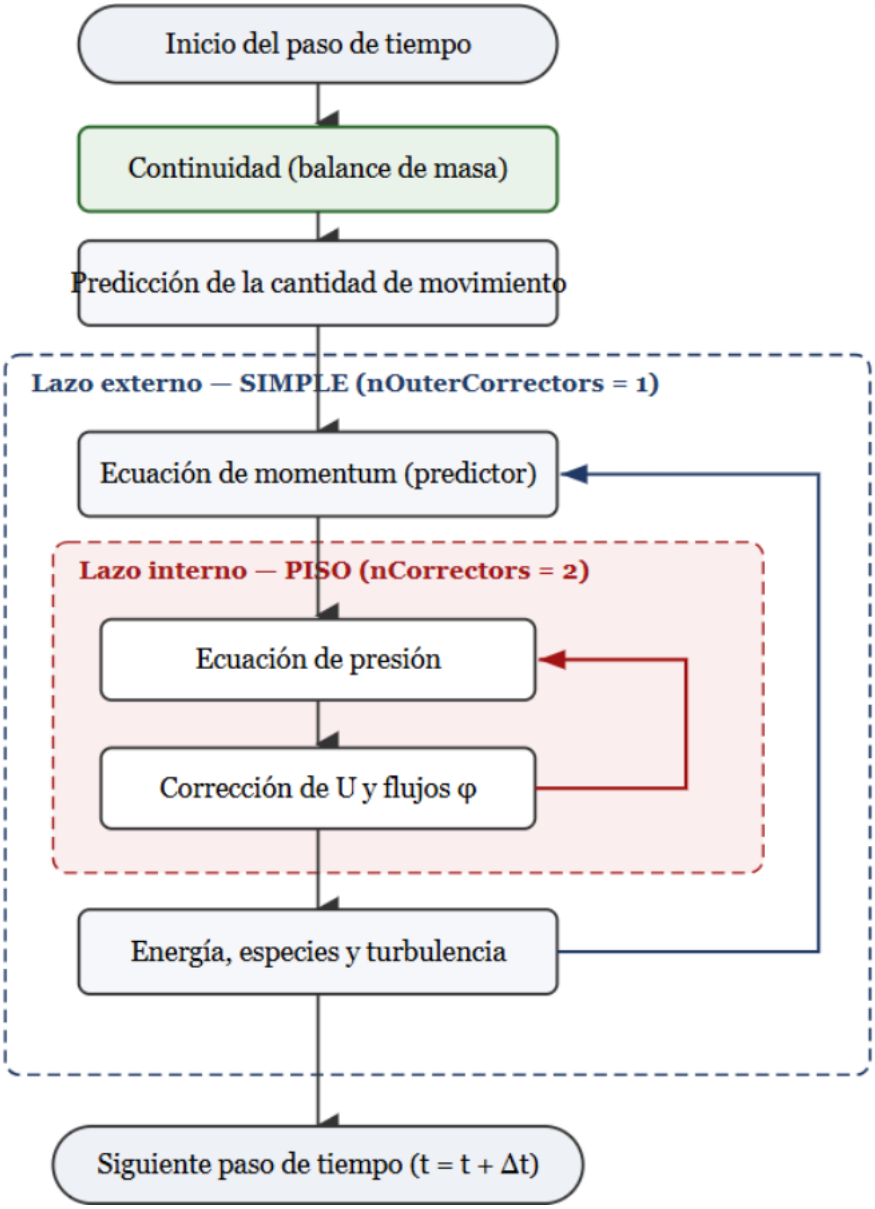
$$\nabla \cdot \left[\left(\frac{1}{aP}\right)\nabla p\right] = \nabla \cdot \left[\frac{H(U)}{aP}\right]$$

Este acoplamiento se resolvió con el algoritmo PIMPLE, que fusiona el procedimiento PISO (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*; Issa, 1986) con la estrategia iterativa SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*; Patankar, 1980). En la configuración empleada, el número de correctores externos (nOuterCorrectors) se fijó en 1, con lo que el algoritmo opera en la práctica en modo PISO dentro de cada paso de tiempo, mientras que el número de correctores de presión (nCorrectors) se estableció en 2. Los correctores por no ortogonalidad (nNonOrthogonalCorrectors) se fijaron en 0, ya que la corrección de la no ortogonalidad de la malla en cuña se aplica a nivel de esquema mediante la opción corrected de laplacianSchemes y snGradSchemes (Sección 3), sin requerir lazos adicionales.

Adicionalmente, se activó el modo transónico (transonic), que incorpora el término convectivo compresible en la ecuación de presión y resulta apropiado para un flujo que atraviesa la condición sónica, y se emplearon los coeficientes rDeltaTSmoothingCoeff y rDeltaTDampingCoeff para suavizar y amortiguar la evolución del paso de tiempo, lo que

contribuye a la estabilidad del cálculo. Con la predicción de la cantidad de movimiento activada (momentumPredictor), esta configuración permite avanzar en el tiempo de forma estable en el régimen compresible y transitorio del flujo.

Figura 31. *Diagrama de flujo del algoritmo PIMPLE: lazo externo (SIMPLE) y lazo interno de corrección de presión (PISO), con los correctores empleados (nOuterCorrectors = 1, nCorrectors = 2)*



Fuente. Por obtención propia con base en Holzmann (2017).

7.2. Solvers lineales por campo

Cada campo se resolvió con un solucionador lineal acorde con la naturaleza de su sistema. La presión, cuya ecuación es de tipo elíptico y la más costosa del cálculo, se resolvió con el método multigrid GAMG (*Geometric-Algebraic Multi-Grid*) y un suavizador Gauss-Seidel, que acelera la convergencia al operar sobre mallas de distinta resolución. La densidad se actualizó

con un solucionador diagonal, de resolución directa e inmediata. Los campos de velocidad, energía, especies y variables de turbulencia (U, h, e, k, omega, H2, Air, Yi) se resolvieron con el método iterativo PBiCGStab (gradiente biconjugado estabilizado) precondicionado con DILU. Para cada campo se fijaron una tolerancia absoluta (tolerance), que define el residual máximo admisible, y una tolerancia relativa (relTol); en los campos de transporte se acotó, además, el número de iteraciones lineales mediante minIter y maxIter. La configuración adoptada se recoge en el siguiente diccionario fvSolution

Figura 32. *Configuración representativa del diccionario fvSolution (pendiente de ajustar al archivo definitivo).*

```
solvers
{
    p
    {
        solver          GAMG;
        smoother        GaussSeidel;
        tolerance       1e-06;
        relTol          0.05;
    }

    pFinal
    {
        $p;
        relTol          0;
    }

    "(rho|rhoFinal)"
    {
        solver          diagonal;
        tolerance       1e-6;
        relTol          0;
    }

    "(U|h|e|k|omega|H2|Air|Yi).*"
    {
        solver          PBiCGStab;
        preconditioner  DILU;
        tolerance       1e-7;
        relTol          0;
        minIter         1;
        maxIter         50;
    }
}

PIMPLE
{
    momentumPredictor       yes;
    nOuterCorrectors        1;
    nCorrectors             2;
    nNonOrthogonalCorrectors 0;
    transonic               yes;
    rDeltaTSmoothingCoeff   0.005;
    rDeltaTDampingCoeff     0.02;
}

relaxationFactors
{
    equations
    {
        U               1.0;
        h               1.0;
        k               1.0;
        omega           1.0;
        H2              1.0;
        Air             1.0;
    }
}
```

Fuente. Por obtención propia

7.3. Factores de relajación y control de la solución

El control de la solución se apoya en dos elementos: los factores de relajación y el seguimiento de los residuales. En este trabajo, los factores de relajación (relaxationFactors) de todas las ecuaciones se fijaron en la unidad (1.0); es decir, no se aplicó subrelajación, opción habitual en un cálculo transitorio resuelto en modo PISO, donde la exactitud temporal se preserva mediante el paso de tiempo reducido y no mediante el amortiguamiento entre iteraciones. El criterio de convergencia se basa en el residual, magnitud que cuantifica en qué medida la solución actual satisface el sistema algebraico. Para un campo φ, el residual se define como el desbalance de la Ecuación 5.7, evaluado sobre todas las celdas y normalizado:

Ecuación 65. Factores de relajación

$$r\varphi = \frac{\sum P \mid bP - (aP\varphi P - \sum NaN\varphi N)\mid}{n}$$

donde *n* es un factor de normalización. La iteración de cada campo se detiene cuando su residual desciende por debajo de la tolerancia especificada, y el paso de tiempo se considera convergido cuando todos los campos satisfacen su criterio. Durante las corridas se verificó, además, que los residuales presentaran una tendencia decreciente y estable, sin oscilaciones que delataran problemas de convergencia.

7.4. Restricciones físicas

Para preservar la consistencia física de la solución durante los transitorios más severos de la inyección, se impusieron restricciones sobre la presión y la temperatura mediante el diccionario fvConstraints. Las restricciones de tipo limitPressure y limitTemperature acotan ambos campos a un intervalo físicamente admisible, de modo que las perturbaciones locales que surgen cuando el frente de hidrógeno penetra en las primeras celdas, donde los gradientes son extremos, no deriven en valores no físicos ni en la divergencia del cálculo. Este mecanismo, junto con el paso de tiempo reducido y las salvaguardas del lazo PIMPLE, constituyó la principal garantía de estabilidad numérica del modelo.

8. SOLUCIÓN NUMÉRICA

Definidos los esquemas de discretización y el procedimiento de solución del sistema de ecuaciones, esta sección describe la configuración con la que se ejecutó la simulación (especificada en el diccionario controlDict) y la estrategia de cómputo en paralelo empleada para reducir los tiempos de cálculo.

8.1. Configuración de la corrida

La simulación se ejecutó con la aplicación foamRun y el módulo de solución multicomponentFluid, apropiado para un flujo compresible con transporte de múltiples especies como la mezcla hidrógeno–aire. El cálculo se inició en el instante t = 0 (startFrom startTime) y se extendió hasta un tiempo final de 0,002 s (endTime), equivalente a 2 ms, coherente con la duración característica del evento de inyección analizado.

El paso de tiempo se controló de forma adaptativa. Partiendo de un valor inicial de 1×10^{-7} s (deltaT), la opción adjustTimeStep on permite que el solver reajuste el paso en cada iteración para mantener el número de Courant por debajo del valor máximo prescrito (maxCo = 0,2), sin superar un tope de 1×10^{-9} s (maxDeltaT). El número de Courant, criterio de estabilidad asociado a la resolución explícita del término convectivo (Courant et al., 1928), se define como:

Ecuación 66. Número de Courant

$$Co = |U|\Delta t - \Delta x \leq \max C\,o$$

donde $|U|$ es la magnitud de la velocidad local, Δt el paso de tiempo y Δx el tamaño característico de la celda. Este control resulta esencial en la vecindad de la boquilla, donde el flujo supera la velocidad del sonido y exige pasos de tiempo muy reducidos para preservar la estabilidad (Anderson, 2021). Los resultados se escribieron a intervalos de 5×10^{-6} s (writeInterval) bajo el criterio adjustableRunTime, que ajusta ligeramente el paso para coincidir con los instantes de escritura, en formato ascii con 12 cifras significativas (writePrecision). La opción runTimeModifiable habilita la modificación de parámetros durante la ejecución, y la función probes registra la evolución temporal de las magnitudes en puntos fijos del dominio. La configuración completa se recoge a continuación:

Figura 33. *Diccionario controlDict empleado en las simulaciones.*

```
application     foamRun;
solver          multicomponentFluid;
startFrom       startTime;
startTime       0;
stopAt          endTime;
endTime         0.002;
deltaT          1e-7;
adjustTimeStep  on;
maxCo           0.2;
maxDeltaT       1e-9;
writeControl    adjustableRunTime;
writeInterval   5e-06;
writeFormat     ascii;
writePrecision  12;
purgeWrite      0;
runTimeModifiable yes;

functions
{
    #include "probes"
}
```

Fuente. Por obtención propia

8.2. Ejecución y paralelización

Para reducir los tiempos de cálculo, el dominio se dividió en cuatro subdominios (numberOfSubdomains = 4) mediante el método de partición scotch, que minimiza el número de caras compartidas entre procesadores y equilibra la carga computacional. La descomposición se realizó con la utilidad decomposePar, la simulación se ejecutó en paralelo sobre cuatro procesos mediante mpirun, y los resultados se reunificaron con reconstructPar. El cómputo se llevó a cabo en un equipo de escritorio bajo el subsistema WSL con Ubuntu 22.04. El diccionario de descomposición empleado fue:

Figura 34. *Diccionario decomposeParDict empleado en las simulaciones*

```
numberOfSubdomains  4;
method              scotch;
```

Fuente. Por obtención propia

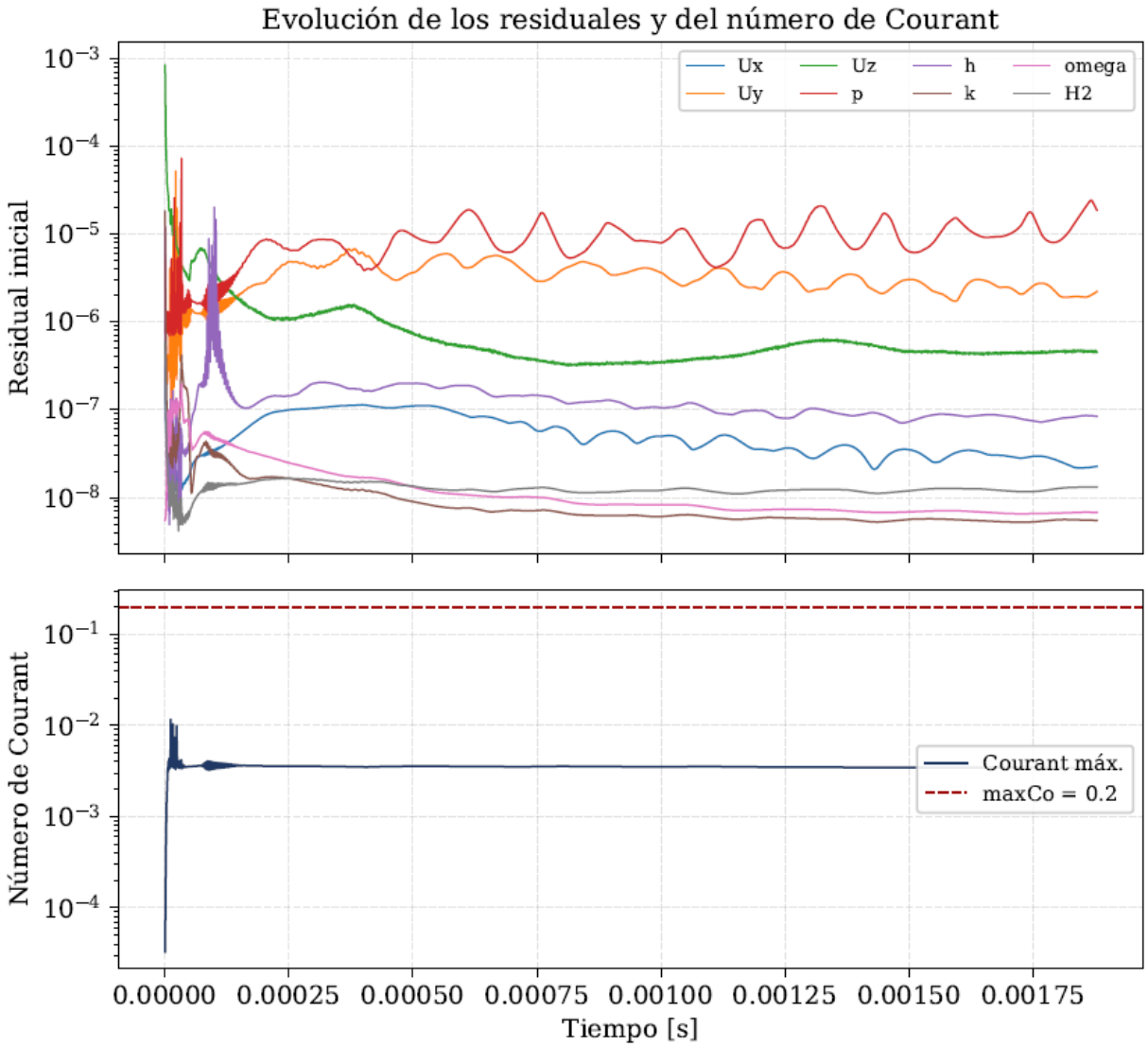
Para las corridas más extensas se aprovechó la capacidad de reanudación del solver: al ajustar startFrom al valor latestTime en el controlDict, la simulación retoma el cálculo desde el último instante escrito, sin repetir la descomposición del dominio, ya que los directorios processorN

conservan el avance alcanzado. Este procedimiento resultó indispensable para completar el conjunto de casos dentro de los recursos disponibles.

8.3. Monitoreo de convergencia y estabilidad

Durante la ejecución se supervisó la evolución de los residuales de cada campo y del número de Courant, que el control adaptativo del paso de tiempo mantuvo acotado por debajo de 0,2. La función probes permitió seguir la evolución de las variables en puntos fijos del dominio, mientras que el examen de los residuales confirmó una tendencia decreciente y estable, sin oscilaciones que delataran problemas de convergencia. Este seguimiento fue especialmente relevante en los primeros instantes de la inyección, cuando los gradientes son más severos y el paso de tiempo se reduce de forma automática para preservar la estabilidad del cálculo.

Figura 35. *Evolución de los residuales iniciales de cada campo (escala logarítmica) y del número de Courant máximo a lo largo de la corrida, con la referencia del maxCo = 0,2*



Fuente. Por obtención propia

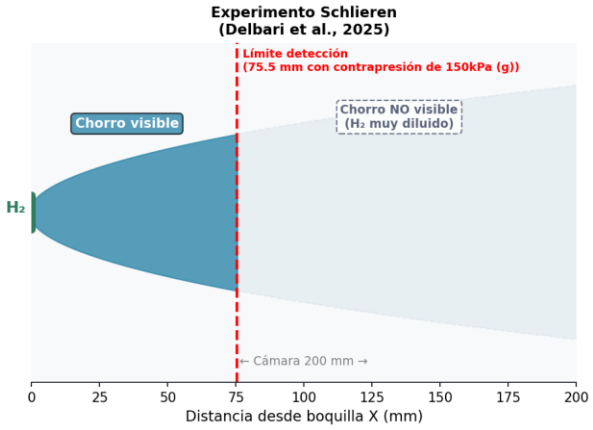
9. VALIDACIÓN

La validación de la simulación numérica consiste en la comparación de los resultados obtenidos con los datos presentados en el trabajo experimental de Delbari et al. (2025), evaluando el error relativo de tres parámetros: la penetración axial del chorro (Zt) a t=2ms, el flujo másico (ṁ) y la tasa de momento (Ṁn). Dado que la simulación CFD calcula la fracción másica de H_2 (Y_H_2) mientras que el experimento mide la penetración visual mediante técnicas Schlieren, fue necesario determinar un umbral de fracción másica equivalente al límite de detección del sistema óptico, procedimiento descrito en la sección 9.1.

9.1. Determinación del umbral equivalente con las técnicas Schlieren

Las imágenes Schlieren presentan limitaciones en la detección del chorro, ya que esta técnica únicamente permite visualizar el flujo cuando existe un gradiente apreciable en el índice de refracción entre el fluido inyectado y el medio receptor, el cual está directamente relacionado con la densidad local, como se observa en la figura 36. El sistema Schlieren configurado por Delbari et al. (2025) consta de espejos parabólicos con una distancia focal de 1542 mm una fuente de luz puntual (*pinhole*) y una cuchilla (*knife-edge*) ubicada en el plano focal, cuya posición y orientación determinan la sensibilidad del sistema óptico. La variación del índice de refracción del medio con la densidad del fluido desvía los rayos de luz incidente, generando el contraste característico en las imágenes capturadas.

Figura 36. *Detección de H2 en un experimento Schlieren*



Fuente. Por obtención propia

Para determinar el límite de detección del sistema óptico, se emplea la relación de Gladstone-Dale, la cual establece la proporcionalidad entre el índice de refracción (n), la densidad del fluido y la constante específica de Gladstone-Dale (K) (Settles & Hargather, 2017):

Ecuación 67. Relación de Gladstone-Dale

$$\frac{n-1}{\rho} = K$$

Las imágenes Schlieren no cuantifican directamente el índice de refracción absoluto (n), sino sus gradientes espaciales en la dirección perpendicular al eje óptico y a la cuchilla. A partir de la diferenciación de la relación de Gladstone-Dale, el gradiente de densidad en la dirección X se expresa como (Settles & Hargather, 2017):

Ecuación 68. Gradiente de densidad

$$\frac{\delta \rho}{\delta x} = \frac{1}{K} \cdot \frac{\delta n}{\delta x}$$

Cuando el sistema presenta una mezcla de especies como H2-aire, se debe hallar la constante de Gladstone-Dale de la mezcla, a partir de las fracciones másicas y la constante Gladstonte-Dale de cada fluido.

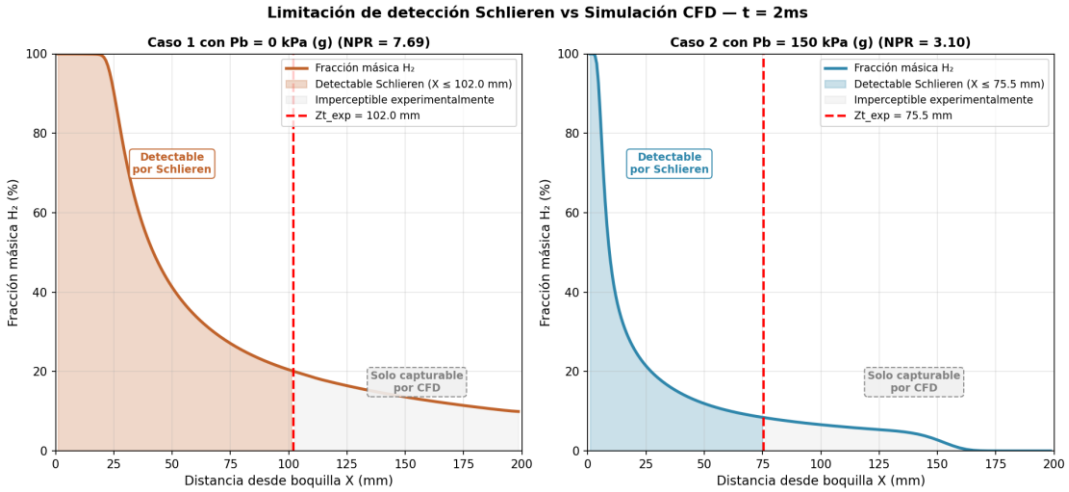
Ecuación 69. Constante de Gladstone-Dale para una mezcla de H2-aire

$$K_{mezcla} = Y_{H2} \cdot K_{H2} + Y_{aire} \cdot K_{aire}$$

Donde la literatura dice que la constante de Gladstne-Dale para el hidrógeno es de (Grauer & Kempf, 2018, Tabla 1) y para el aire es de (Harvard Natural Sciences, s.f.). En el caso del aire, el sistema Schlieren alcanza a detectar la estructura del flujo a partir de un gradiente de densidad mínimo de (Settles & Hargather, 2017); dado que el H2 presenta una densidad significativamente menor que el aire, los gradientes de densidad generados por el chorro son más débiles, requiriendo una mayor concentración de H2 para generar un gradiente detectable por el sistema óptico.

Debido a las limitaciones de la técnica Schlieren, las mediciones experimentales de Delbari et al. (2025) registran la frontera del chorro únicamente donde las variaciones refractivas superan el umbral de sensibilidad del equipo. Por el contrario, la simulación numérica captura concentraciones extremadamente bajas de hidrógeno que resultan imperceptibles en el montaje experimental (ver figura 37). Por esta razón, la determinación de un umbral numérico de detección equivalente es fundamental para comparar y validar con rigor los resultados del modelo CFD frente a las imágenes experimentales.

Figura 37. *Detección Schlieren vs simulación CFD. Elaboración propia*



Fuente. Por obtención propia

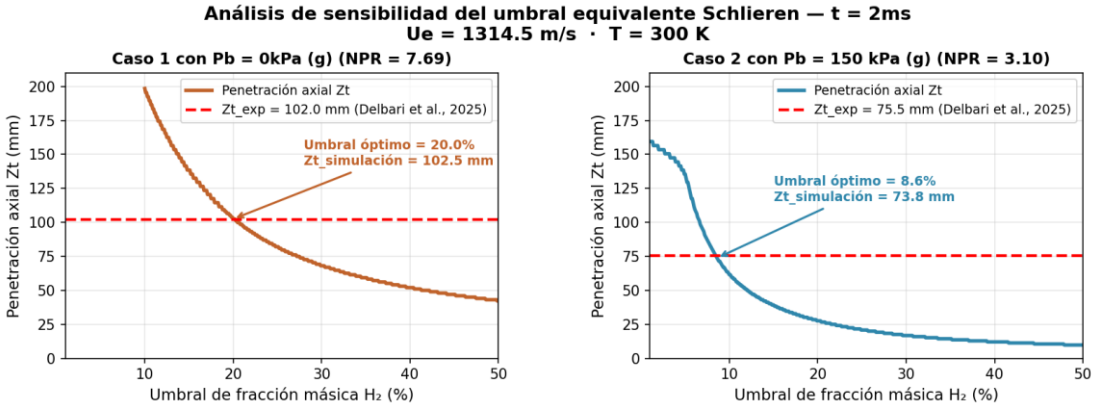
La selección de este umbral se realizó mediante un análisis de sensibilidad, evaluando la fracción másica del H2 en un intervalo comprendido entre el 1% y el 50%, calculando para cada uno la penetración axial del chorro al tiempo de t=2ms. Asimismo, se analizaron los gradientes de densidad resultantes a la luz de los límites ópticos reportados en la literatura. El umbral óptimo adoptado para cada caso correspondió a aquel valor de concentración que minimizó el error relativo entre la penetración calculada por la simulación y la medida experimentalmente. Como se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 9.1. Análisis de sensibilidad del umbral equivalente

Umbral de la fracción másica de H2 [%]	Penetración (Zt) con Pb = 0kPa (g), artículo Delbari et. al. (2025) [mm]	Penetración (Zt) simulación, caso 1 Pb = 0kPa (g) [mm]	Error Zt, caso 1 Pb = 0kPa (g) [%]	Penetración (Zt) con Pb= 150kPa (g), artículo Delbari et. al. (2025) [mm]	Penetración (Zt) simulación, caso 2 Pb = 150kPa (g) [mm]	Error Zt, caso 2 Pb = 150kPa (g) [%]
1	102.0	> 200	> 100	75.5	159.5	>100
5		> 200	>100		135.5	79.5
8.6		> 200	>100		73.8	-2.3
10		198.5	94.6		61.4	-18.6
15		138.5	35.8		39.2	-48
20		102.5	0.5		27.5	-63.6
30		68.1	-33.3		16.7	-77.9
50		42.1	-58.7		9.7	-87.1

Como se ilustra en la figura 38, para el caso 1 el umbral es de un 20% y para el caso 2 el umbral es de 8.6%. Este comportamiento se justifica teóricamente mediante la relación de Gladstone-Dale, puesto que el cambio en la contrapresión (Pb) modifica la densidad base del medio circundante, alterando la magnitud del gradiente de índice de refracción necesario para alcanzar la sensibilidad del sistema óptico.

Figura 38. *Análisis de sensibilidad del umbral equivalente Schlieren – t=2ms, Ue=1314.5 m/s, T=300K.*



Fuente. Por obtención propia

Para cuantificar esta diferencia, se calculó el gradiente de densidad ($|\partial\rho/\partial x|$) en la posición experimental de penetración de cada caso, aplicando la relación de Gladstone-Dale con la constante de mezcla K_mezcla. Para el caso con contrapresión de 0 kPa (g) (NPR=7.69), en la posición experimental Zt=102mm, el gradiente calculado es $|\partial\rho/\partial x| = 2.48$ kg/m⁴, valor que representa el 25% del límite de detección Schlieren (10 kg/m⁴, Settles & Hargather, 2017). Este gradiente débil indica que el sistema óptico apenas detecta el frente del chorro, justificando el uso de un umbral alto del 20%. Para el caso con contrapresión de 150 kPa (g) (NPR=3.10), en la posición Zt=75.5mm, el gradiente calculado es $|\partial\rho/\partial x| = 8.76$ kg/m⁴, equivalente al 88% del límite de detección. Este gradiente más intenso indica que el sistema Schlieren detecta con mayor facilidad el frente del chorro, justificando el umbral bajo de 8.6%.

9.2 Parámetros de comparación

La validación del modelo numérico se realiza mediante la comparación de tres variables fundamentales reportadas en el estudio experimental de Delbari et al. (2025): la penetración axial del chorro a t=2ms, el flujo másico y la tasa de momento.

- **Penetración axial del chorro (zt):** Es e parámetro principal de validación, definida como la distancia axial desde el orificio de inyección hasta el frente del chorro al tiempo de t=2ms. Para la simulación numérica, esta longitud se determina aplicando el umbral equivalente de fracción másica de H2, mientras que en el trabajo experimental de (Delbari et al., 2025) se obtiene mediante el procesamiento digital de las imágenes Schlieren.
- **Flujo másico ($\dot{m}$) y tasa de momento:** Ambos parámetros se calculan a partir de las condiciones termodinámicas en la boquilla, asumiendo la condición de flujo sónico o bloqueado (*choked flow*, M = 1). Las diferencias entre los valores simulados y los datos experimentales en estas dos variables se atribuyen al coeficiente de descarga real de la boquilla (Cd). Esto se debe a que la simulación asume una condición de entrada ideal sin perdidas de fricción.

El procesamiento de los datos exportados de OpenFOAM 12 se realizó mediante el comando foamPostProcess (graphCell), el cual permite extraer perfiles axiales y radiales de las variables del flujo a lo largo de líneas definidas en el dominio. Los datos exportados fueron procesados con Python, utilizando las bibliotecas NumPy y Matplotlib para el cálculo de los parámetros de validación, la aplicación del umbral equivalente Schlieren y la generación de las gráficas comparativas.

10. VARIACIÓN DE PARÁMETROS

Verificado el modelo frente al caso base (Sección 8), se desarrolló un estudio paramétrico orientado a evaluar la influencia de la contrapresión de la cámara y de la velocidad de inyección sobre la formación de la mezcla hidrógeno–aire y, en particular, sobre la extensión y la ubicación de la zona inflamable en el instante previo al encendido.

10.1. Diseño del estudio paramétrico

El estudio se articuló en torno a dos parámetros de control. El primero es la relación de presiones de la boquilla (NPR), definida como el cociente entre la presión total aguas arriba y la contrapresión de la cámara, ecuación 4.

El segundo es el número de Mach de la corriente inyectada, que clasifica el flujo en subsónico, sónico y supersónico (Anderson, 2021). Se adoptó como referencia un NPR crítico de 1,89, valor a partir del cual el flujo se estrangula en la garganta y alcanza condiciones sónicas, según la caracterización experimental de Yeganeh et al. (2024). La matriz de casos se organizó en dos barridos complementarios: uno de contrapresión, con la velocidad de inyección fija, y otro de velocidad, con la contrapresión fija, de modo que el efecto de cada variable pudiera aislarse. En todos los casos la presión de inyección se mantuvo en 10 000 kPa y la temperatura en 300 K. La Tabla 6 resume la matriz de simulaciones.

Tabla 6. *Matriz de casos del estudio paramétrico.*

Barrido	Contrapresión (kPa)	Velocidad (m/s)	N° Mach	P. inyección (kPa)	T (K)
Contrapresión	2000	1314,5	1,0	10 000	300
Contrapresión	3055	1314,5	1,0	10 000	300
Contrapresión	3171	1314,5	1,0	10 000	300
Contrapresión	4000	1314,5	1,0	10 000	300
Velocidad	3055	1051,6	0,8	10 000	300
Velocidad	3055	1314,5	1,0	10 000	300
Velocidad	3055	1600	1,2	10 000	300

Fuente. Por obtención propia

10.2. Barrido de contrapresión

El primer barrido evaluó el efecto de la contrapresión de la cámara sobre la formación y penetración del chorro, manteniendo constantes el número de Mach unitario, la velocidad de 1314,5 m/s, la presión de inyección de 10 000 kPa y la temperatura de 300 K. Se consideraron

contrapresiones de 2000, 3055, 3171 y 4000 kPa. El valor de 2000 kPa se tomó del estudio experimental de referencia (Yeganeh et al., 2024), mientras que los valores intermedios de 3055 y 3171 kPa se derivaron de relaciones de compresión representativas de motores de inyección directa de hidrógeno, cuya justificación se detalla en la Sección 9 (Barbato y Cantore, 2021).

El propósito de este barrido fue cuantificar cómo la presión del recinto modifica la penetración axial del chorro y el desplazamiento de la zona inflamable a lo largo del eje de la cámara. Una mayor contrapresión incrementa la densidad del gas ambiente y, en consecuencia, tiende a frenar el avance del chorro y a favorecer una expansión radial más temprana, con efecto directo sobre la uniformidad de la mezcla. El análisis de estos casos permite establecer la tendencia entre la presión de cámara y la disponibilidad de hidrógeno en la región de encendido.

10.3. Barrido de velocidad y número de Mach

El segundo barrido fijó la contrapresión en 3055 kPa, la presión de inyección en 10 000 kPa y la temperatura en 300 K, variando la velocidad de la corriente para cubrir tres regímenes de flujo: subsónico, con número de Mach de 0,8 y velocidad de 1051,6 m/s; sónico, con Mach unitario y velocidad de 1314,5 m/s; y supersónico, con Mach de 1,2 y velocidad de 1600 m/s. La velocidad del caso sónico se tomó del artículo base (Delbari et al., 2025), mientras que la del caso supersónico corresponde al valor máximo admisible por el inyector considerado, de acuerdo con su documentación técnica.

La comparación entre los casos subsónico (1051,6 m/s) y supersónico (1600 m/s), evaluados bajo idéntica contrapresión e idéntica presión de inyección, constituye el contraste central del estudio. El régimen de flujo determina la estructura del chorro subexpandido, la tasa de arrastre de aire y, con ello, la disponibilidad de hidrógeno en la región de encendido. El análisis de estos tres casos permite discernir en qué medida el aumento de la velocidad de inyección favorece o perjudica la formación de una mezcla inflamable en el punto y el instante requeridos.

10.4. Post-procesamiento y análisis

El análisis de cada caso se realizó con la utilidad foamPostProcess, empleando la función graphCell para extraer perfiles axiales y radiales de la fracción másica de hidrógeno en función de la distancia desde la boquilla, y probes para registrar la evolución temporal en puntos fijos del dominio. Sobre los perfiles se delimitó la zona inflamable, comprendida entre el límite inferior (4 % en volumen) y el superior (75 % en volumen) de inflamabilidad del hidrógeno (Crowl y Jo, 2007). Dado que el solver reporta la composición en fracción másica, dichos límites se convirtieron desde la fracción molar mediante:

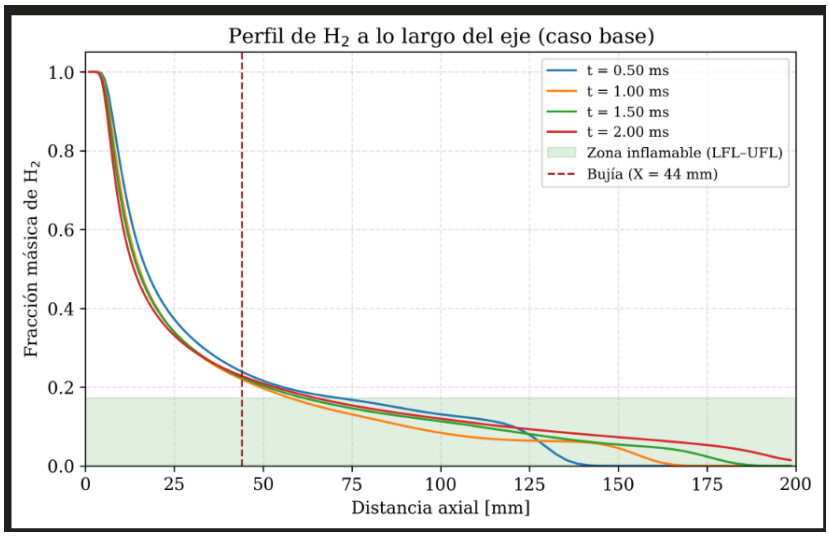
Ecuación 70. Fracción másica a partir de la molar

$$YH2 = \frac{(XH2\ MH2)}{[XH2\ MH2 + (1 - XH2)Maire]}$$

donde X_{H2} es la fracción molar de hidrógeno, y M_{H2} y M_{aire} las masas molares del hidrógeno y del aire. Con esta conversión, la zona inflamable queda comprendida, en fracción másica, aproximadamente entre $Y_{H2} \approx 0{,}0029$ (LFL) y $Y_{H2} \approx 0{,}173$ (UFL).

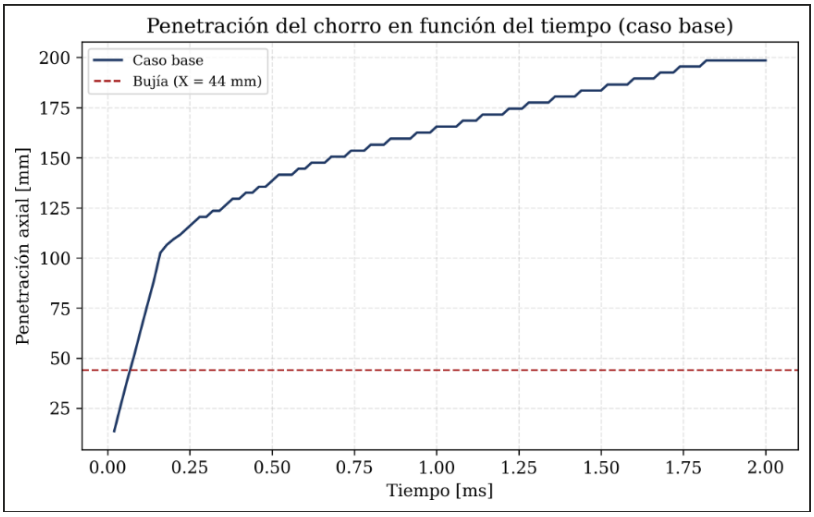
El estudio incorporó, además, la posición de la bujía, ubicada a 44 mm de la boquilla, como criterio para determinar si en ese punto existe mezcla dentro del rango inflamable en el instante de encendido. De forma complementaria se examinaron la penetración axial del chorro en función del tiempo y el perfil radial de concentración en la posición de la bujía. El conjunto de estos indicadores, evaluado a través de los casos de contrapresión y velocidad, sustenta las conclusiones del estudio respecto de las condiciones de inyección más favorables para lograr una mezcla homogénea e inflamable antes de la ignición.

Figura 39. *Perfil de fracción másica de H_2 frente a la distancia, con zona de inflamabilidad*



Fuente. Por obtención propia

Figura 40. *Penetración axial del chorro en función del tiempo para los casos analizados*



Fuente. Por obtención propia

Todo lo que menciono anteriormente será aclarado con más detalles en la sección de resultados, donde se profundizara y se darán más información sobre las simulaciones realizadas.

RESULTADOS

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas en OpenFOAM para la inyección transitoria y compresible de hidrógeno gaseoso (H2) en una cámara de combustión. El análisis se divide en tres partes principales de estudio: la validación experimental del modelo, la evaluación del efecto de la contrapresión a alta presión de inyección y la influencia de la velocidad de inyección. Lo que permite evaluar el comportamiento del chorro en términos de la penetración axial y radial para evidenciar la difusividad de cada caso y el estado de la mezcla en términos de inflamabilidad a una distancia de X=44mm, a partir de la fracción másica del hidrógeno y el aire.
Para evaluar sistemáticamente la dinámica del fluido inyectado, se configuraron y ejecutaron tres grupos de simulación:

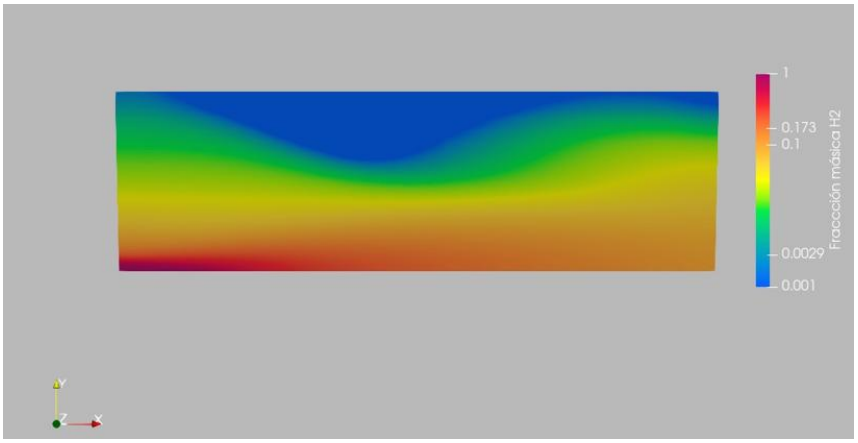
- **Casos de Validación (Baja Presión):** Comparación directa con las mediciones experimentales por técnica Schlieren reportadas por Delbari et al. (2025). Se mantuvieron fijas la velocidad de inyección equivalente a la velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 800 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), variando la contrapresión de la cámara en dos niveles (Pb1 = 0 kPa (g) y Pb2 = 150 kPa (g)).
- **Efecto de la Contrapresión (Alta Presión):** Evaluación del comportamiento del chorro bajo condiciones de inyección de alta presión (Pinj = 10000 kPa) a velocidad sónica (Ue = 1314.5 m/s) y T = 300 K. Se analizaron cuatro contrapresiones en la cámara (P_b1 = 2000 kPa, Pb2 = 3055 kPa, Pb3 = 3171 kPa y Pb4 = 4000 kPa).
- **Efecto de la Velocidad de Inyección (Alta Presión):** Evaluación del régimen cinético del chorro manteniendo constantes la presión de inyección (Pinj = 10000 kPa), la contrapresión (Pb = 3055 kPa) y la temperatura (T = 300 K), variando la velocidad de inyección en tres niveles (Ue1 = 1051.6m/s, Ue2 = 1314.5 m/s y Ue3 = 1600 m/s).

1. CASOS DE VALIDACIÓN

1.1 Caso 1 contrapresión de 0kPa (g)

Esta simulación se realizó bajo los siguientes parámetros: velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 800 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión Pb = 0 kPa (g) y NPR =7.69. En la figura 41 se ilustra la simulación en fracción másica de hidrógeno en un t=2ms, en donde se observa una mayor concentración de H2 cerca a la boquilla y cómo el chorro se va mezclando con el aire en penetración axial y radial.

Figura 41. *Simulación caso 1: velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 800 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión Pb = 0 kPa (g)*



Fuente. Por obtención propia

Los datos obtenidos en esta simulación se deben comparar con los del artículo de Delbari et al. (2025). Inicialmente se obtuvieron los valores de flujo másico y tasa de momento, ya que estos se producen en el momento que sucede la inyección. Como se ve en la tabla 7, se presentan los valores impuestos en la simulación, los parámetros marcados con * corresponden a valores calculados teóricamente a partir de las condiciones isentrópicas de la boquilla.

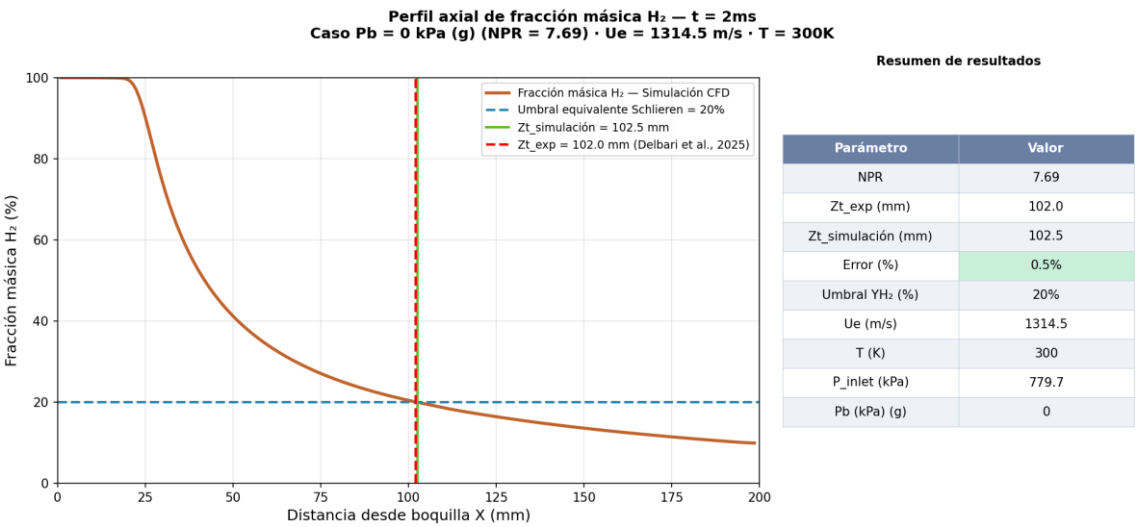
Tabla 7. *Parámetros teóricos caso con Pb = 0kPa (g) (NPR = 7.69) Ue impuesta directamente como condición de frontera.*

Parámetro	Simulación	Artículo (Delbari et al., 2025)	Error (%)
NPR	7.69	7.69	0.0%
Pt (kPa)	779.7	779.7	0.0%
Tt (K)	300.0	300.0	0.0%
T* (K)	250.0	—	—
P* (kPa)	411.6	411.1	0.1%
ρ* (kg/m³)	0.3961	—	—
Ue (m/s)*	1314.5	1314.5	0.0%
ṁ (g/s)	0.411	0.379	8.5%
Ṁn (kg·m/s²)	0.543	0.498	9.1%
ρ_cámara (kg/m³)	1.1768	—	—

Fuente. Por obtención propia

Aplicando el umbral equivalente Schlieren de 20%, determinado en la sección 9.1, se obtiene se obtiene la figura 42 en donde se presenta la fracción másica del hidrógeno vs la penetración axial, donde se evidencia la diferencia entre la penetración simulada y la experimental de Delbari et al. (2025).

Figura 42. *Perfil axial de fracción másica H2 – t =2ms. Velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 800 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión Pb = 0 kPa (g) Y NPR = 7.69*



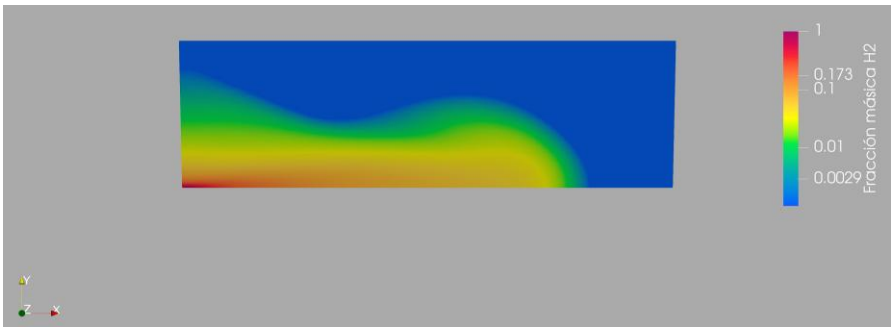
Fuente. Por obtención propia

La penetración axial simulada a t=2ms con umbral del 20% es Zt_simulación=102.2mm, valor que presenta un error de 0.5% respecto al valor experimental reportado por Delbari et al. (2025) de Zt_exp=102mm, confirmando la validez del modelo numérico para este caso.

1.2 Caso 2 contrapresión de 150 kPa (g)

El segundo caso para validar el modelo de simulación se realizó bajo los siguientes parámetros: velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 800 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión Pb = 150 kPa (g) y NPR =3.10. En la figura 42 se ilustra la simulación en fracción másica de hidrógeno en un t=2ms, en donde se observa una mayor concentración de H2 cerca a la boquilla y cómo el chorro se va mezclando con el aire en penetración axial y radial.

Figura 43. *Simulación caso 2: velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 800 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión Pb = 150 kPa (g)*



Fuente. Por obtención propia

Al igual que el caso anterior, se debe hacer una comparación de resultados con los del artículo de Delbari et al. (2025). De igual manera se analizó el flujo másico y tasa de momento. Como se ve en la tabla 8, se presentan los valores impuestos en la simulación, los parámetros marcados con * corresponden a valores calculados teóricamente a partir de las condiciones isentrópicas de la boquilla.

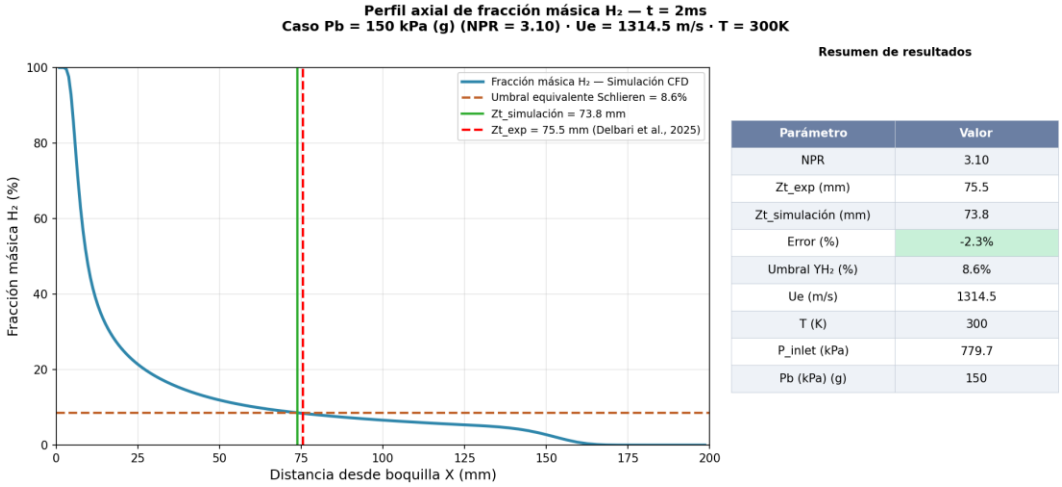
Tabla 8. *Parámetros teóricos caso con Pb = 150kPa (g) (NPR = 7.69) Ue impuesta directamente como condición de frontera*

Parámetro	Simulación	Artículo (Delbari et al., 2025)	Error (%)
NPR	3.10	3.10	0.0%
Pt (kPa)	779.7	779.7	0.1%
Tt (K)	300.0	300.0	0.0%
T* (K)	250.0	—	—
P* (kPa)	411.6	411.1	0.1%
ρ* (kg/m³)	0.3961	—	—
Ue (m/s)*	1314.5	1314.5	0.0%
ṁ (g/s)	0.411	0.379	8.5%
Ṁn (kg·m/s²)	0.543	0.498	9.1%
ρ_cámara (kg/m³)	2.9190	—	—

Fuente. Por obtención propia

Con el umbral equivalente Schlieren de 8.6%, determinado en la sección 9.1, se obtiene la figura 44 en donde se presenta la fracción másica del hidrógeno vs la penetración axial, donde se evidencia la diferencia entre la penetración simulada y la experimental de Delbari et al. (2025).

Figura 44. *Perfil axial de fracción másica H2 – t =2ms. Velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 800 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión Pb = 150 kPa (g) y NPR =3.10*



Fuente. Por obtención propia

La penetración axial simulada a t=2ms con umbral del 8.6% es Zt_simulación=73.8mm, valor que presenta un error de –2.3% respecto al valor experimental reportado por Delbari et al. (2025) de Zt_exp=75.5mm, dando validez del modelo numérico para este caso.

1.3 Análisis de resultados de validación

Como se evidenció en las tablas 7 y 8, los parámetros fundamentales de inyección presentan variaciones menores al contrastarse con los datos reportados por Delbari et al. (2025). Específicamente, el flujo másico y la tasa de momento presentan desviaciones del 8.5% y 9.1%, respectivamente. Esta discrepancia responde a que la condición de frontera en la simulación CFD asume un comportamiento ideal libre de fricción en la garganta de la boquilla, mientras que el estudio de referencia contempla el coeficiente de descarga real (Cd) del inyector experimental, el cual considera pérdidas viscosas y efectos de contracción del flujo. A pesar de esta simplificación, la diferencia se mantiene reducida.

Al evaluar la longitud de penetración axial (Z_t) mediante los umbrales definidos previamente, obtuvieron errores de 0.5% para el primer caso y –2.3% para el segundo. Debido a que Delbari et al. (2025) no detallan numéricamente los gradientes absolutos de densidad empleados en sus imágenes Schlieren, la determinación del umbral equivalente se sustentó con la teoría de Gladstone-Dale en conjunto con un análisis de sensibilidad. Lo que condujo a tener un margen de error reducido confirmando la alta precisión del solver de OpenFOAM para capturar la dinámica del chorro transitorio, respaldando la validación del modelo numérico.

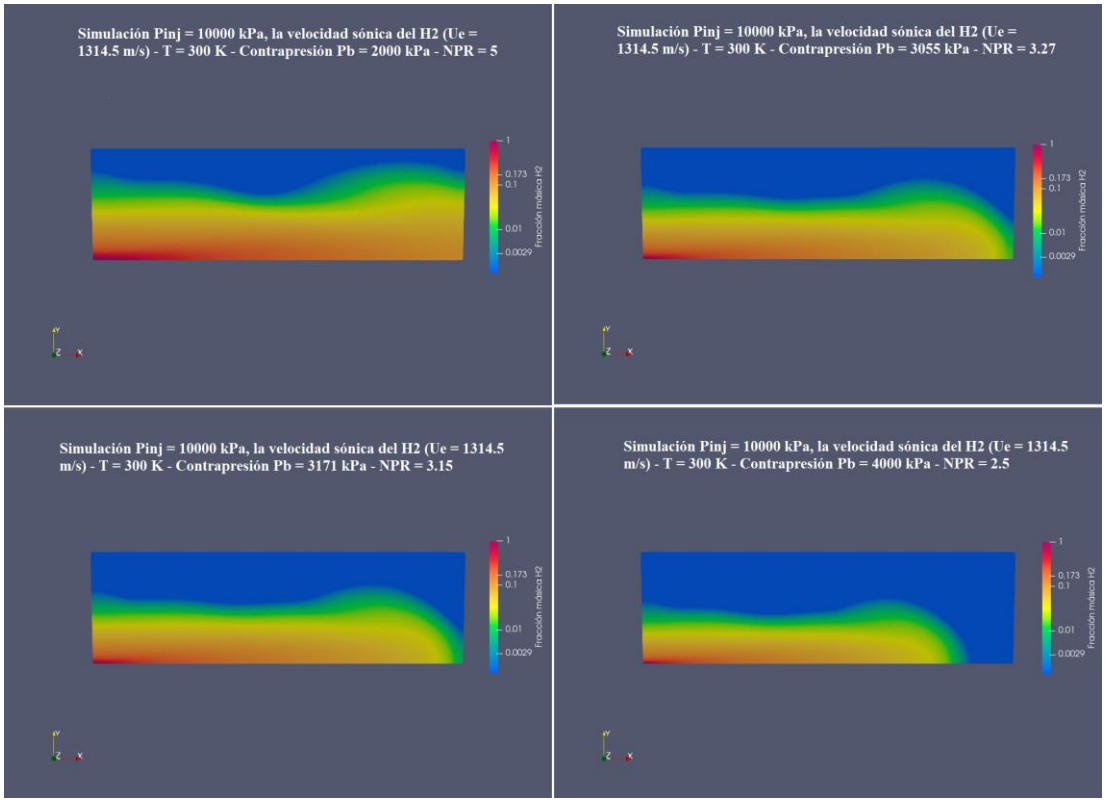
Las figuras 41 y 43 muestran la cantidad de hidrógeno presente en la cámara de combustión en t=2ms, presentando la mezcla que cada caso tiene con el aire. En ellas se evidencia que al tener

menos contrapresión el chorro de hidrógeno no se alcanza a diluir por completo en el dominio propuesto, como se observa en la figura 1.2 con una contrapresión de 0kPa (g) a X=200mm el sistema aun presenta un 10% de la fracción másica de H2 aproximadamente. Por otra parte, en la figura 1.3 se ilustra el comportamiento del chorro con una contrapresión de 150 kPa (g), el cual no choca contra las paredes de la cámara, permitiendo observar de una mejor manera una mezcla H2-aire más homogénea. Esto se puede corroborar con la figura 1.4, donde se logra ver la caída de la fracción másica del H2 antes de llegar a X=200mm.

2. VARIACIÓN DE LA CONTRAPRESIÓN

El segundo grupo de simulaciones corresponde al análisis paramétrico de la variación de la contrapresión en la cámara para evaluar su efecto directo sobre el comportamiento dinámico, la penetración y la dispersión del chorro de hidrógeno. Para este estudio, los parámetros iniciales en la boquilla se mantuvieron constantes: presión de inyección Pinj = 10000 kPa, la velocidad sónica del H2 (Ue = 1314.5 m/s) y T = 300 K. A partir de estas condiciones de entrada, se configuraron cuatro casos de estudio variando la contrapresión en el dominio P_b1 = 2000 kPa, Pb2 = 3055 kPa, Pb3 = 3171 kPa y Pb4 = 4000 kPa con NPR de 5, 3.27, 3.15 y 2.5 respectivamente.

Figura 45. *Simulaciones variación de contrapresión – t =2ms. Velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 10000 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión P_b1 = 2000 kPa, Pb2 = 3055 kPa, Pb3 = 31*



Fuente. Por obtención propia

En la figura 45 se presentan la simulación de los cuatro casos a t=2ms, en donde se logra observar el impacto que tiene el chorro de H2 a una alta presión de inyección y diferentes contrapresiones en la expansión radial y axial.

2.1 Comportamiento del chorro a partir de la fracción másica en el eje axial y la inflamabilidad

El chorro presenta variaciones en su penetración axial (Zt) como se puede evidenciar en la figura 45, visualmente a mayor contrapresión la penetración axial que alcanza el chorro es menor, lo que influye en su difusividad y por ende en la formación de la mezcla y dilución en el dominio (Yeganeh et al., 2024).

Tomando como referencia la geometría de la cámara de combustión utilizada para construir para realizar la simulación, se evaluó la condición de inflamabilidad de la mezcla en la posición axial X=44mm, punto donde se ubica la bujía de encendido. ara este análisis, se consideraron los límites de inflamabilidad másica del hidrógeno en aire, definidos entre un límite inferior (LFL = 0.29%) y un límite superior (UFL = 17.3%).

Como se muestra en la tabla 9, se exponen los valores obtenidos de la penetración axial para cada caso junto con su porcentaje de fracción másica de H2 en X=44mm, con el fin de determinar si la mezcla local se encuentra dentro de la ventana operativa de ignición.

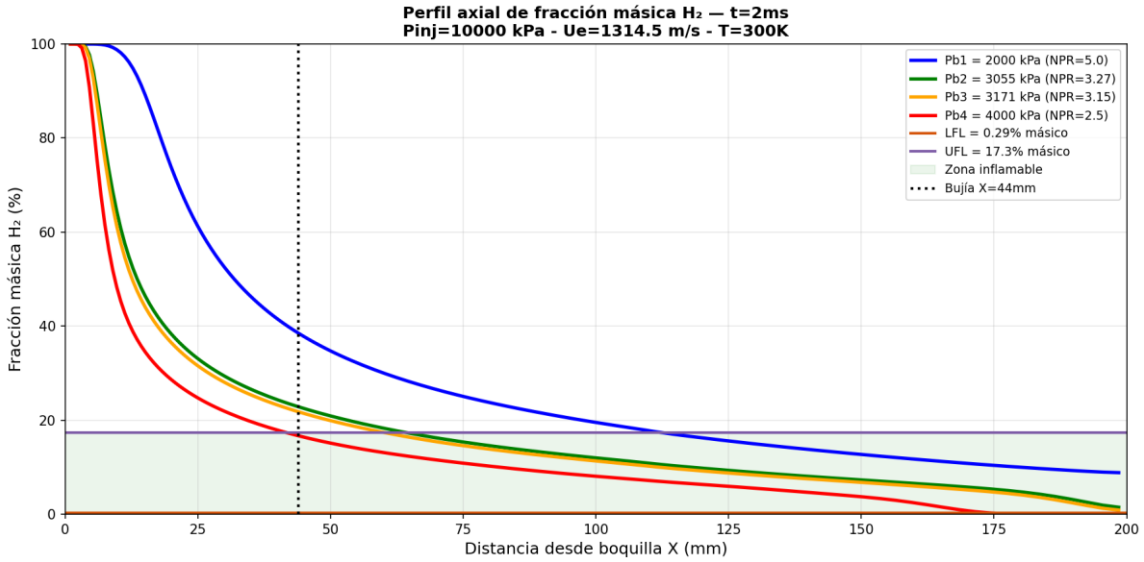
Tabla 9. *Penetración axial y fracción másica en X=44mm — t=2ms P_inlet=10000 kPa, Ue=1314.5 m/s · T=300K, LFL=0.29% másico, UFL=17.3% másico*

Caso	NPR	Pb (kPa)	Zt UFL (mm)	Zt LFL (mm)	YH_2 en X=44mm (%)	Inflamable en X=44mm
1	5.0	2000	114.5	198.5	38.47	No
2	3.27	3055	64.7	198.5	22.83	No
3	3.15	3171	61.4	198.5	21.77	No
4	2.5	4000	42.1	174.5	16.67	Sí

Fuente. Por obtención propia

La figura 46 permite visualizar de una mejor manera lo presentado en la tabla 2.1. Como se observa a una mayor contrapresión (Pb) el hidrógeno ingresa a una menor distancia a la zona de inflamabilidad. Además, la contrapresión de 4000kPa es la única que alcanza a entrar en zona de inflamabilidad antes de X=44mm. Otro aspecto analizar es la comparación con la figura 45, ya que se evidencia que a una distancia X=200mm los tres primeros casos con contrapresión aproximadamente mantienen entre un 5% y un 10% de fracción másica de H2.

Figura 46. *Perfil axial de fracción másica H2– t =2ms. Velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 10000 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión Pb1, Pb2, Pb3 y Pb4*



Fuente. Por obtención propia

2.2 Comportamiento del chorro a partir de la fracción másica en el eje radial y la inflamabilidad

La simulación numérica permite evidenciar de manera clara la expansión radial del chorro de hidrógeno a partir del campo de fracción másica, lo que resulta fundamental para determinar en qué punto transversal el fluido ingresa a la ventana de inflamabilidad.Siguiendo el mismo criterio metodológico aplicado en la sección anterior, se analizó la distribución de fracción másica de H2 en la posición axial X = 44 mm (ubicación de la bujía de encendido) para un tiempo transitorio de t = 2ms, en función de la distancia radial.

En la Tabla 10 se exponen los resultados obtenidos para el ancho radial y la concentración de la mezcla en dicha sección transversal. A partir de estos datos, se confirma que la condición de contrapresión Pb4 = 4000 kPa es la única que permanece completamente dentro de la zona de inflamabilidad (LFL = 0.29% a UFL = 17.3% másico), reforzando la información presentada previamente sobre su comportamiento a lo largo del eje axial.

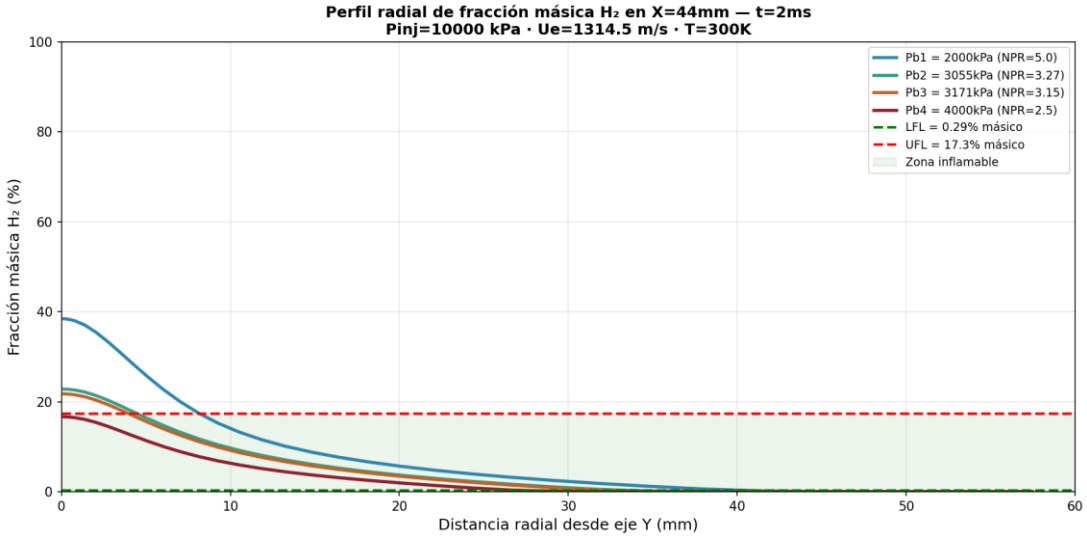
Tabla 10. *Penetración radial y fracción másica en X=44mm — t=2ms P_inlet=10000 kPa, Ue=1314.5 m/s · T=300K, LFL=0.29% másico, UFL=17.3% másico*

Caso	NPR	Pb (kPa)	Inicio zona inflamable (mm)	Fin zona inflamable (mm)	Ancho zona inflamable (mm)
1	5.0	2000	9.3	41.3	32.0
2	3.27	3055	5.1	34.8	29.7
3	3.15	3171	4.3	34.8	30.5
4	2.5	4000	0.1	29.2	29.0

Fuente. Por obtención propia

En la figura 47 se observa lo presentado en la tabla 9. En donde a mayor contrapresión (Pb) el hidrógeno ingresa a una menor distancia a la zona de inflamabilidad. Además, la contrapresión de 4000kPa es la única que se mantiene dentro de la zona de inflamabilidad.

Figura 47. *Penetración radial y fracción másica en X=44mm - t =2ms. Velocidad del sonido del hidrógeno (Ue = 1314.5 m/s), la presión de inyección (Pinj = 10000 kPa (g)) y la temperatura ambiente (T= 300 K), con una contrapresión Pb1 -Pb2-Pb3-Pb4*



Fuente. Por obtención propia

2.3 Análisis de resultados de la variación de la contrapresión

El análisis paramétrico del segundo grupo de simulaciones, desarrollado para una presión de inyección de 10000kPa, velocidad sónica de 1314.5 m/s y temperatura de 300K, permite comprender detalladamente la interacción entre la relación de presiones de la boquilla (NPR) y la dinámica de mezcla del hidrógeno en la cámara de combustión. Al incrementar de forma progresiva la contrapresión desde 2000kPa (NPR = 5) hasta 4000 kPa (NPR = 2.5), la densidad del aire dentro de la cámara aumenta proporcionalmente. Por un lado, a mayor densidad en la cámara de combustión se genera una fuerza de arrastre que choca contra el chorro de hidrógeno

provocando que, a los t = 2ms, la penetración axial (Zt) alcance una longitud menor en el caso de 4000 kPa. Por otro lado, al encontrar resistencia al avance axial, el flujo experimenta una redistribución transversal del momento lineal, intensificando la cizalladura en los bordes, ensanchando el chorro y favoreciendo la dilución del núcleo superrico en el eje radial (Yeganeh et al., 2024; Huang et al., 2023).

Esta alteración en la contrapresión de mezcla tiene implicaciones directas en la condición de inflamabilidad alrededor de la bujía de encendido, ubicada en la posición axial X = 44mm. Para garantizar una ignición efectiva, la concentración local a los t = 2 ms debe situarse dentro del rango operativo de inflamabilidad del hidrógeno en aire, definido entre el 0.29% (LFL) y el 17.3% (UFL) en fracción másica. (Huang et al., 2023; Dhyani & Subramanian, 2019). En los casos con contrapresiones de 2000 kPa, 3055 kPa y 3171 kPa (NPR =3.15), la densidad del medio permite que el núcleo del chorro tenga concentraciones sobresaturadas (YH2 > 17.3%) sobrepasando la distancia de X = 44mm, es decir, que el flujo de H2 ingresa a la zona inflamable a distancias mayores de X = 50 mm.

Por el contrario, en el caso de mayor contrapresión de 4000kPa (NPR = 2.5), la fuerte desaceleración y la rápida dilución logran que el núcleo del chorro se disipe antes de superar la posición de la bujía; de este modo, la curva del perfil axial entra a la zona inflamable antes de X = 44mm y el perfil radial se mantiene integralmente por debajo del límite superior del 17.3% a lo largo de toda la sección transversal, garantizando que el volumen se encuentre con una mezcla homogénea y apta para la ignición.

Finalmente, la evaluación en la región lejana del dominio evidencia la homogeneización global del gas. Mientras que en las contrapresiones de 2000 kPa, 3055 kPa y 3171 kPa el hidrógeno aún conserva entre un 5% y un 10% de fracción másica en la posición X = 200 mm, en la condición de 4000 kPa se registra una caída de concentración mucho antes de dicha frontera, evitando el choque contra los límites lejanos de la cámara.

Tabla 11. *Resumen comparativo axial y radial t=2ms · P_inlet=10MPa · Ue=1314.5 m/s · T=300K - Zt UFL: inicio zona inflamable axial · Zt LFL: fin zona inflamable axial LFL=0.29% másico · UFL=17.3% másico.*

Caso	NPR	Pb (kPa)	Zt UFL (mm)	Zt LFL (mm)	YH_2 en X=44mm (%)	Inflamable axial X=44mm	Inicio zona inflamable radial (mm)	Fin zona inflamable radial (mm)	Ancho zona inflamable radial (mm)
1	5.0	2000	114.5	198.5	38.47	No	9.3	41.3	32.0
2	3.27	3055	64.7	198.5	22.83	No	5.1	34.8	29.7
3	3.15	3171	61.4	198.5	21.77	No	4.3	34.8	30.5
4	2.5	4000	42.1	174.5	16.67	Sí	0.1	29.2	29.0

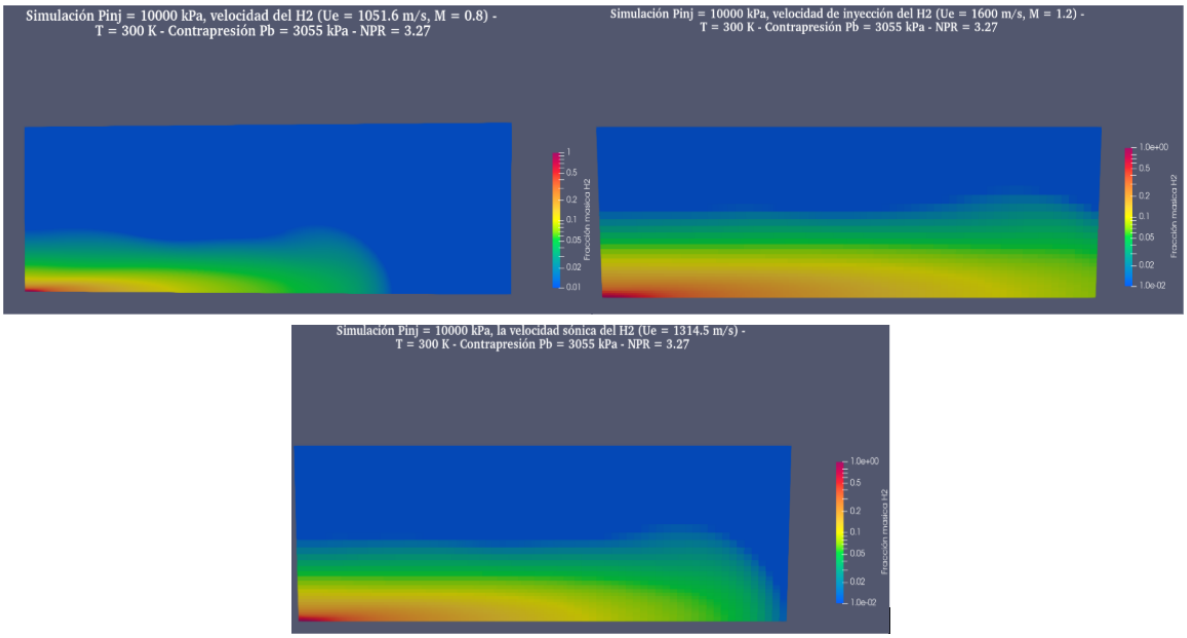
Fuente. Por obtención propia

3. VARIACIÓN DE LA VELOCIDAD

El tercer grupo de simulaciones corresponde al análisis paramétrico de la variación de la velocidad de inyección, con el fin de evaluar el efecto del régimen de flujo a la salida de la boquilla sobre el comportamiento dinámico, la penetración y la dispersión del chorro de hidrógeno. A diferencia del grupo anterior, en el cual la velocidad permaneció fija en la condición sónica y se modificó la contrapresión de la cámara, en este caso los parámetros del dominio se mantuvieron constantes y se varió únicamente la velocidad de salida del H2 (Yeganeh et al., 2024).

Los parámetros que permanecen fijos en los tres casos son la presión de inyección Pinj = 10000 kPa, la contrapresión de la cámara Pb = 3055 kPa y la temperatura ambiente T = 300K. Al conservarse simultáneamente la presión de inyección y la contrapresión, la relación de presiones de la boquilla se mantiene constante en NPR = 3.27 para las tres simulaciones, de modo que las diferencias observadas en los resultados son atribuibles exclusivamente al cambio de velocidad y no a una modificación del grado de subexpansión del chorro. Del mismo modo, se conservan la geometría del dominio computacional (cilindro de 200 mm de longitud axial y 60 mm de radio, representado mediante un sector wedge de 10°), el diámetro de boquilla de 1 mm, el solver multicomponentFluid con el modelo de turbulencia k−ω SST y el instante de evaluación t = 2ms empleado en todos los análisis previos.

Figura 48. *Simulaciones variación de velocidad de inyección – t = 2 ms. Presión de inyección (Pinj = 10000 kPa (g)), temperatura ambiente (T = 300 K) y contrapresión (Pb = 3055 kPa), con velocidades de inyección del hidrógeno Ue1, Ue2 y Ue3*



Fuente. Por obtención propia

A partir de estas condiciones de entrada se configuraron tres casos de estudio variando la velocidad de inyección: Ue1 = 1051.6 m/s, correspondiente a un régimen subsónico con número de Mach M = 0.8; Ue2 = 1314.5 m/s, correspondiente a la velocidad del sonido del

hidrógeno y por tanto a un régimen sónico con M = 1.0; y Ue3 = 1600 m/s, correspondiente a un régimen supersónico con M = 1.2, valor máximo admisible según la documentación técnica del inyector considerado. El caso sónico coincide con el caso Pb2 = 3055 kPa ya presentado en la sección 2, por lo que se incorpora aquí como condición de referencia intermedia entre los dos regímenes nuevos.

Tabla 12. *Parámetros de simulación para la variación de la velocidad — t = 2ms*

Parámetro	Caso 1 Subsónico	Caso 2 Sónico	Caso 3 Supersónico
Velocidad de inyección Ue (m/s)	1051.6	1314.5	1600
Número de Mach (M)	0.8	1.0	1.2
Presión de inyección Pinj (kPa)	10000		
Contrapresión Pb (kPa)	3055		
Relación de presiones NPR	3.27		
Temperatura T (K)	300		
Diámetro de boquilla (mm)	1		
Dominio axial × radial (mm)	200 × 60 (wedge 10°)		
Posición de la bujía (mm)	X = 44		
Límites de inflamabilidad (% másico)	LFL = 0.29 · UFL = 17.3		
Tiempo de evaluación (ms)	2		

Fuente. Por obtención propia

Siguiendo el criterio metodológico aplicado en la sección anterior, el análisis se organiza en dos apartados según la dirección evaluada. En el apartado 3.1 se examina el comportamiento del chorro a lo largo del eje axial y la posición en la que la mezcla ingresa a la ventana de inflamabilidad; en el apartado 3.2 se examina la distribución transversal en la posición axial X = 44mm, correspondiente a la ubicación de la bujía de encendido; y en el apartado 3.3 se integran ambos resultados en el análisis del efecto de la velocidad de inyección sobre la formación de la mezcla H2-aire.

3.1 Comportamiento del chorro a partir de la fracción másica en el eje axial y la inflamabilidad

El chorro presenta variaciones en su penetración axial (Zt) en función de la velocidad de inyección, ya que al incrementar la velocidad de salida con una misma relación de presiones se eleva el flujo de cantidad de movimiento en la boquilla y se reduce el tiempo de residencia del hidrógeno en las capas de cizalladura, retrasando el arrastre de aire y sosteniendo por más distancia el núcleo sobresaturado. (Yeganeh et al., 2024; Huang et al., 2023).

Manteniendo el criterio de la sección anterior, se evaluó la condición de inflamabilidad de la mezcla en la posición axial X = 44mm, punto donde se ubica la bujía de encendido, considerando los límites de inflamabilidad másica del hidrógeno en aire definidos entre un límite inferior (LFL = 0.29%) y un límite superior (UFL = 17.3%).

Como se muestra en la tabla 13, se exponen los valores obtenidos de la penetración axial para cada caso junto con su porcentaje de fracción másica de H2 en X = 44mm, con el fin de determinar si la mezcla local se encuentra dentro de la ventana operativa de ignición.

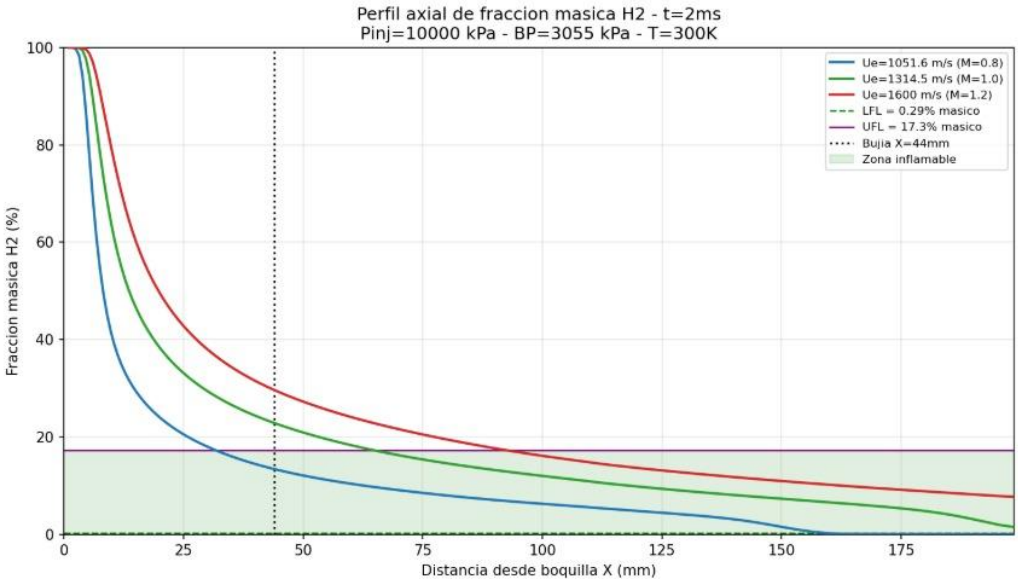
Tabla 13. *Penetración axial y fracción másica en X = 44mm — t = 2ms · Pinj = 10000 kPa · Pb = 3055 kPa · T = 300K · LFL = 0.29% másico · UFL = 17.3% másico*

Caso	Ue (m/s)	M	X_{UFL} (mm)	X_{LFL} (mm)	Longitud zona inflamable (mm)	H2 en X = 44mm (%)	Inflamable en X = 44mm
Subsónico	1051.6	0.8	31.6	158.8	127.2	13.4	Sí
Sónico	1314.5	1.0	64.7	> 200	> 135.3	22.83	No
Supersónico	1600	1.2	92.2	> 200	> 107.8	29.6	No

Fuente. Por obtención propia

La figura 49 permite visualizar de una mejor manera lo presentado en la tabla 13. Como se observa, a una mayor velocidad de inyección (Ue) el hidrógeno ingresa a una mayor distancia a la zona de inflamabilidad, desplazándose el límite XUFL de 31.6mm en el caso subsónico a 64.7mm en el sónico y a 92.2mm en el supersónico; es decir, cada incremento de 0.2 en el número de Mach traslada el inicio de la zona inflamable aproximadamente 30mm aguas abajo. Además, la velocidad de 1051.6 m/s es la única que alcanza a entrar en zona de inflamabilidad antes de X = 44mm, con una fracción másica de 13.4%, mientras que los casos sónico y supersónico atraviesan dicha posición por encima del UFL, con concentraciones de 22.83% y 29.6% respectivamente. Otro aspecto a analizar es el comportamiento en la región lejana del dominio, ya que se evidencia que a una distancia X = 200mm el caso subsónico ya ha alcanzado el LFL en 158.8mm, mientras que los casos sónico y supersónico aún conservan aproximadamente un 1% y un 8% de fracción másica de H2, por lo que su límite inferior de inflamabilidad se ubica en la frontera del dominio o más allá de ella y las longitudes reportadas para estos dos casos deben interpretarse como valores mínimos.

Figura 49. *Perfil axial de fracción másica de H2 – t = 2ms. Velocidades de inyección Ue1 = 1051.6 m/s (M = 0.8), Ue2 = 1314.5 m/s (M = 1.0) y Ue3 = 1600 m/s (M = 1.2), con una presión de inyección (Pinj = 10000 kPa), contrapresión (Pb = 3055 kPa) y T=300K*



Fuente. Por obtención propia

Adicionalmente, la figura 49 evidencia que las tres curvas conservan el mismo ordenamiento a lo largo de todo el dominio, sin cruzarse en ningún punto: la curva del caso subsónico se sitúa siempre por debajo de la del sónico y está por debajo de la del supersónico. Este comportamiento monótono confirma que el efecto de la velocidad sobre la dilución axial es sistemático y no se invierte en ninguna región del chorro. Así, mientras el caso subsónico ha descendido al 20% de fracción másica en torno a X = 26mm, el caso supersónico conserva ese mismo nivel hasta cerca de X = 77mm, es decir, tres veces más lejos de la boquilla.

3.2 Comportamiento del chorro a partir de la fracción másica en el eje radial y la inflamabilidad

La simulación numérica permite evidenciar de manera clara la expansión radial del chorro de hidrógeno a partir del campo de fracción másica, lo que resulta fundamental para determinar en qué punto transversal el fluido ingresa a la ventana de inflamabilidad. Siguiendo el mismo criterio metodológico aplicado en el apartado anterior, se analizó la distribución de fracción másica de H2 en la posición axial X = 44mm (ubicación de la bujía de encendido) para un tiempo transitorio de t = 2ms, en función de la distancia radial.

En la tabla 14 se exponen los resultados obtenidos para el ancho radial y la concentración de la mezcla en dicha sección transversal. A partir de estos datos, se confirma que la condición de velocidad subsónica Ue1 = 1051.6 m/s es la única que permanece completamente dentro de la zona de inflamabilidad (LFL = 0.29% a UFL = 17.3% másico), reforzando la información presentada previamente sobre su comportamiento a lo largo del eje axial.

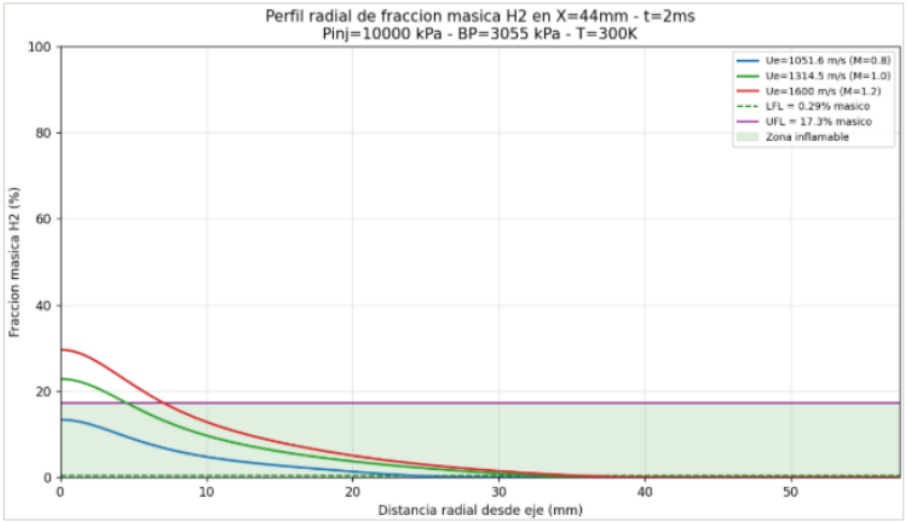
Tabla 14. *Penetración radial y fracción másica en X = 44mm — t = 2ms · Pinj = 10000 kPa · Pb = 3055 kPa · T = 300K · LFL = 0.29% másico · UFL = 17.3% másico*

Caso	Ue (m/s)	M	H2 en el eje (%)	r_{UFL} (mm)	r_{LFL} (mm)	Ancho zona inflamable (mm)	Geometría de la zona inflamable
Subsónico	1051.6	0.8	13.4	0.1	24.9	24.8	Sección circular
Sónico	1314.5	1.0	22.83	5.1	34.8	29.7	Corona circular
Supersónico	1600	1.2	29.6	7.0	36.5	29.5	Corona circular

Fuente. Por obtención propia

En la figura 50 se observa lo presentado en la tabla 14. Las tres curvas alcanzan su valor máximo sobre el eje del chorro y decaen de forma continua hacia la periferia, conservando el mismo ordenamiento jerárquico observado en el perfil axial, con valores sobre el eje de 13.4%, 22.83% y 29.6% que coinciden con las lecturas de la figura 49 en X = 44mm y confirman la consistencia interna del posprocesamiento aplicado. La diferencia determinante entre los tres perfiles radica en la posición del máximo respecto del umbral superior de inflamabilidad: en el caso subsónico la curva completa se mantiene por debajo del UFL, de modo que la zona inflamable no adopta la forma de una franja anular sino la de una sección circular continua que abarca desde el eje mismo hasta r = 24.9mm; en los casos sónico y supersónico, por el contrario, la mezcla permanece sobresaturada en la región central y solo ingresa a la banda inflamable a partir de r = 5.1mm y r = 7.0mm respectivamente, conformando una corona circular con un núcleo no inflamable en el centro.

Figura 50. *Penetración radial y fracción másica en X = 44mm – t = 2ms. Velocidades de inyección Ue1 = 1051.6 m/s (M = 0.8), Ue2 = 1314.5 m/s (M = 1.0) y Ue3 = 1600 m/s (M = 1.2), con una presión de inyección (Pinj = 10000 kPa), contrapresión (Pb = 3055 kPa), Tamb*



Fuente. Por obtención propia

Un aspecto adicional que se desprende de la figura 50 es la proximidad entre las curvas sónica y supersónica frente a la separación que ambas mantienen respecto de la subsónica. El ancho de la zona inflamable crece de 24.8mm en el caso subsónico a 29.7mm en el sónico, pero se mantiene prácticamente igual en 29.5mm en el supersónico, y el borde interno de la corona se desplaza únicamente 1.9mm entre estos dos últimos casos. Ello indica que la dispersión transversal del hidrógeno se satura al alcanzar la condición sónica y que, más allá de ella, el aporte adicional de cantidad de movimiento se traduce casi exclusivamente en penetración axial y no en ensanchamiento del chorro, comportamiento coherente con el estrangulamiento del flujo en la boquilla propio de las condiciones subexpandidas.

3.3 Análisis de resultados de la variación de la velocidad

El análisis paramétrico del tercer grupo de simulaciones, desarrollado para una presión de inyección de 10000 kPa, una contrapresión de 3055 kPa y una temperatura de 300K, permite comprender detalladamente la interacción entre el flujo de cantidad de movimiento en la boquilla y la dinámica de mezcla del hidrógeno en la cámara de combustión. Al mantenerse constante la relación de presiones en NPR = 3.27, el grado de subexpansión del chorro no se modifica entre casos y el único mecanismo que actúa es el incremento del momento lineal de salida. Por un lado, al aumentar la velocidad de inyección desde 1051.6 m/s hasta 1600 m/s, el chorro atraviesa las capas de cizalladura próximas a la boquilla en un tiempo menor, lo que reduce el arrastre de aire por unidad de longitud recorrida y provoca que, a los t = 2ms, el núcleo sobresaturado se prolongue hacia aguas abajo. Por otro lado, al no encontrar una mayor resistencia del medio el momento adicional no se redistribuye transversalmente, de modo que el ensanchamiento del chorro no acompaña al aumento de su penetración. (Eismark et al., 2026; Dhyani & Subramanian, 2019).

Esta alteración en la velocidad de inyección tiene implicaciones directas en la condición de inflamabilidad alrededor de la bujía de encendido, ubicada en la posición axial X = 44mm. Para garantizar una ignición efectiva, la concentración local a los t = 2ms debe situarse dentro del rango operativo de inflamabilidad del hidrógeno en aire, definido entre el 0.29% (LFL) y el 17.3% (UFL) en fracción másica. En los casos con velocidades de 1314.5 m/s (M = 1.0) y 1600 m/s (M = 1.2), el mayor flujo de cantidad de movimiento permite que el núcleo del chorro conserve concentraciones sobresaturadas (YH2 > 17.3%) sobrepasando la distancia de X = 44mm, es decir, que el flujo de H2 ingresa a la zona inflamable a distancias mayores de X = 60mm y X = 90mm respectivamente.

Por el contrario, en el caso de menor velocidad de 1051.6 m/s (M = 0.8), la dilución más temprana del chorro logra que el núcleo se disipe antes de superar la posición de la bujía; de este modo, la curva del perfil axial entra a la zona inflamable en X = 31.6mm, antes de X = 44mm, y el perfil radial se mantiene integralmente por debajo del límite superior del 17.3% a lo largo de toda la sección transversal, garantizando que el volumen se encuentre con una mezcla homogénea y apta para la ignición.

Un resultado relevante del análisis radial es que, aun cuando en los regímenes sónico y supersónico la mezcla sobre el eje resulta demasiado rica para encender a los t = 2ms, existe una región plenamente inflamable a tan solo 5.1mm y 7.0mm del eje dentro de la misma sección transversal de la bujía. Por consiguiente, un desplazamiento radial moderado del electrodo bastaría para acceder a una mezcla apta sin necesidad de modificar la velocidad de inyección, la contrapresión o el instante de encendido, lo cual constituye una alternativa de intervención considerablemente menos invasiva que la reconfiguración de las condiciones de operación.

Finalmente, la evaluación en la región lejana del dominio evidencia la homogeneización global del gas. Mientras que en la velocidad de 1051.6 m/s el hidrógeno alcanza el LFL en X = 158.8mm y se diluye por completo dentro de la región simulada, en las condiciones de 1314.5 m/s y 1600 m/s aún se conserva aproximadamente un 1% y un 8% de fracción másica en la posición X = 200mm, de modo que el chorro interactúa con los límites lejanos de la cámara. Este comportamiento es consistente con lo observado en el análisis de la variación de la contrapresión del apartado 2.3, donde la falta de dilución en el extremo del dominio se asociaba igualmente a un exceso de penetración axial del chorro.

En conjunto, los resultados de la tabla 15 permiten afirmar que la velocidad de inyección gobierna la ubicación de la mezcla inflamable más que su extensión: en la dirección axial el aumento del número de Mach traslada la ventana inflamable aguas abajo de manera aproximadamente lineal, y en la dirección radial la desplaza hacia afuera del eje sin ampliarla de forma apreciable una vez superada la condición sónica. Para la configuración estudiada, el régimen subsónico resulta el único que garantiza mezcla inflamable en la posición nominal de la bujía y, simultáneamente, el único cuya ventana radial incluye al eje del chorro, lo que les confiere además la mayor tolerancia frente a desviaciones de montaje del electrodo o a asimetrías del chorro real.

Tabla 15. *Resumen comparativo axial y radial — t = 2ms · Pinj = 10000 kPa · Pb = 3055 kPa · T = 300K · NPR = 3.27 — XUFL: inicio zona inflamable axial · rUFL–rLFL: zona inflamable radial en X = 44mm · LFL = 0.29% másico · UFL = 17.3% másico*

Caso	Ue (m/s)	M	X_{UFL} (mm)	H2 en X = 44mm (%)	Inflamable en bujía	r_{UFL} (mm)	r_{LFL} (mm)	Ancho radial (mm)
Subsónico	1051.6	0.8	31.6	13.4	Sí	0.1	24.9	24.8
Sónico	1314.5	1.0	64.7	22.83	No	5.1	34.8	29.7
Supersónico	1600	1.2	92.2	29.6	No	7.0	36.5	29.5

Fuente. Por obtención propia

CONCLUSIONES

- El análisis numérico realizado mediante la simulación en CFD en el software OpenFOAM permitió caracterizar la estructura dinámica del chorro de hidrógeno inyectado en una cámara de combustión de volumen contante. A partir de la evaluación de las distribuciones espaciales de fracción másica, se logró determinar la evolución de la penetración axial y la dispersión radial del gas bajo distintas condiciones operativas de inyección. Los resultados evidencian que la variación de parámetros fundamentales como la velocidad de inyección, la presión de entrada y la contrapresión de la cámara ejercen un control determinante sobre el flujo; específicamente, el incremento en la contrapresión acelera la transferencia de momento lineal hacia el aire ambiente, favoreciendo la expansión transversal del chorro y acortando la penetración axial.
- La estrategia de simulación numérica para el proceso de inyección de hidrógeno se estableció de manera robusta y eficiente al seleccionar un dominio computacional bidimensional axisimétrico tipo wedge, el cual redujo de forma sustancial el costo y el tiempo de cómputo en comparación con un modelo tridimensional completo. Esta simplificación geométrica mantuvo una alta fidelidad física al acoplarse con el solucionador multicomponente compresible y las condiciones de frontera adecuadas para capturar los gradientes de densidad e interacciones transitorias del flujo. La validez de la metodología fue corroborada cuantitativamente mediante la validación frente a los datos experimentales de referencia de Delbari et al. (2025), donde se obtuvieron errores relativos bajos en la penetración axial de apenas de 0.5% (Caso 1: Ue = 1314.5m/s, T=300K, Pinj =800kPa (g) y Pb= 0kPa (g)) y -2.3% (Caso 2: Ue = 1314.5m/s, T=300K, Pinj =800kPa (g) y Pb= 150kPa (g)). Estos reducidos márgenes de desviación confirmaron la elevada precisión y confiabilidad del modelo en OpenFOAM, estableciendo una base metodológica sólida para el desarrollo de los análisis paramétricos posteriores.
- El estudio paramétrico transitorio permitió simular el comportamiento del chorro de hidrógeno bajo diferentes condiciones de inyección, evidenciando que tanto la contrapresión de la cámara como el número de Mach de inyección modifican de forma significativa su dinámica temporal. En el contexto de un motor de ciclo Otto de inyección directa de hidrógeno, estos resultados tienen implicaciones directas en el diseño del sistema de inyección: al incrementar la contrapresión de 2000 a 4000 kPa (NPR de 5 a 2.5), representando mayores relaciones de compresión del motor, la penetración axial se redujo y la mezcla se homogeneizó con mayor rapidez. Por otra parte, al variar el régimen de flujo de M=0.8 a M=1.2 se observaron dinámicas transitorias distintas, con oscilaciones más marcadas y un re-enriquecimiento del núcleo del chorro en el caso supersónico. Esto confirma que en un ciclo Otto, la simulación transitoria captura fenómenos críticos como los tiempos de llegada de la zona inflamable a la posición de la bujía (0.066-0.072ms) que determinan el instante óptimo de encendido, información que un análisis estacionario no evidenciaría.
- El análisis del desempeño del proceso de inyección mostró que el aumento de la contrapresión favorece la homogeneización y el ingreso de la mezcla a la ventana de

inflamabilidad en la posición de la bujía (X=44mm), siendo la condición de 4000 kPa la única que permanece completamente dentro de dicho rango. Trasladando estos hallazgos al diseño de un motor de ciclo Otto de H_2, la contrapresión de 4000 kPa representa una relación de compresión alta, lo que indica que motores con mayor relación de compresión generan condiciones más favorables para la formación de mezcla inflamable en la posición de la bujía. En contraste, el aumento del número de Mach amplía la dispersión radial (de 14.8mm a ~29.5mm) pero retrasa la disponibilidad axial de mezcla inflamable, evidenciando que la velocidad de inyección y la contrapresión deben optimizarse conjuntamente para garantizar la ignición efectiva en cada ciclo del motor.

REFERENCIAS

Alzahrani, A., & Haidar, J. (2018). *RANS and LES simulation of a swirling flow in a combustion chamber with different swirl intensities. Journal of Applied Fluid Mechanics*, *11*(2), 433-445. https://doi.org/10.18860/jafm.11.02.28292

Anderson. J (2021) - *Modern Compressible Flow*. https://www.academia.edu/53758864/Anderson_Modern_Compressible_Flow

Akar, F., & Özener, O. (2024). *Numerical investigation of in-cylinder gas motion dynamics in a heavy-duty direct injection hydrogen internal combustion engine*. *International Journal of Hydrogen Energy*, *86*, 730–741. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.08.338

Babayev, R., Andersson, A., Dalmau, A. S., Im, H. G., & Johansson, B. (2021). *Computational characterization of hydrogen direct injection and nonpremixed combustion in a compression-ignition engine*. *International Journal of Hydrogen Energy*, *46*(35), 18678–18696. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.02.223

Barbato, A., & Cantore, G. (2021). *3D CFD simulation of a gaseous fuel injection in a hydrogen-fueled internal combustion engine*. *E3S Web of Conferences*, *312*, 07001. https://doi.org/10.1051/e3sconf/202131207001

Cardelle, J. I., & Carloni, M. G. (2024). *Análisis, simulación y evaluación de un motor de combustión interna de □2 + □2*. https://ri.itba.edu.ar/entities/publication/a48e1b1f-5b79-4582-bede-d83a57206298

Çengel, Y. A., & Boles, M. A. (2015). *Thermodynamics: An Engineering Approach* (8th ed.). McGraw-Hill Education. ISBN: 978-0-07-339817-4

Courant, R., Friedrichs, K., & Lewy, H. (1928). *Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik*. *Mathematische Annalen*, 100(1), 32–74. https://doi.org/10.1007/BF01448839

Crowl, D. A., & Jo, Y.-D. (2007). *The hazards and risks of hydrogen*. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *20*(2), 158–164. https://doi.org/10.1016/j.jlp.2007.02.002

Delbari, H., Munshi, S., & McTaggart-Cowan, G. (2025). *Characterizing injection and ignition of hydrogen and hydrogen-methane blend fuels in a static combustion chamber*. *Fuel (London, England)*, *381*(133562), 133562. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.133562

Dhyani, V., & Subramanian, K. A. (2019). Fundamental characterization of backfire in a hydrogen fuelled spark ignition engine using CFD and experiments. *International Journal of Hydrogen Energy*, *44*(60), 32254–32270. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.10.077

Elsevier. (s. f.). *Stratified charge engines*. Recuperado el 27 de febrero de 2026, de https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/stratified-charge-engines

Eismark, J., Ehleskog, R., Simonsson, T., & Hindi, G. (2026). *Internal combustion engine system* (Patente de EE. UU. n.º 12,546,263 B2). U.S. Patent and Trademark Office. https://patents.google.com/patent/US12546263

Farzam, R., & McTaggart-Cowan, G. (2024). *Hydrogen-diesel dual-fuel combustion sensitivity to fuel injection parameters in a multi-cylinder compression-ignition engine*. International Journal of Hydrogen Energy, 49, 850–867. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.09.124

Feasibility analysis of a direct injection H2 internal combustion engine: Numerical assessment and proof-of-concept https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319923022140

Ferziger, J. H., & Perić, M. (2002). *Computational methods for fluid dynamics* (3.ª ed.). Springer.

Gammaidoni, T., Miliozzi, A., Zembi, J., & Battistoni, M. (2024). *Hydrogen mixing and combustion in an SI internal combustion engine: CFD evaluation of premixed and DI strategies*. Case Studies in Thermal Engineering, 55(104072), 104072. https://doi.org/10.1016/j.csite.2024.104072

Grauer, S.J., & Kempf, A.M. (2018). *Instantaneous 3D flame imaging by background-oriented schlieren tomography. Combustion and Flame*, 196, 284-299. https://doi.org/10.1016/j.combustflame. 2018.06.010

Harvard Natural Sciences Lecture Demonstrations. (s.f.). *Schlieren Optics. Harvard University, Faculty of Arts and Sciences*. Recuperado de: https://sciencedemonstrations.fas.harvard.edu/presentations/schlieren-optics

Huang, Z.-M., Wang, L.-M., Pan, H., Li, J.-P., Wang, T., & Wang, L. (2023). Experimental study on the impact of hydrogen injection strategy on combustion performance in internal combustion engines. *ACS Omega, 8*(42), 39427–39436. https://doi.org/10.1021/acsomega.3c05104

International Council on Clean Transportation (The ICCT). (s. f.-b). *Life-cycle GHG emissions of heavy-duty vehicle fuels in Europe*. Recuperado el 27 de febrero de 2026, de https://theicct.org/publication/lca-ghg-emissions-hdv-fuels-europe-feb23

IdealSimulations. (2019, 30 de agosto). *Turbulence models in CFD.* https://www.idealsimulations.com/resources/turbulence-models-in-cfd/

Issa, R. I. (1986*). Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting*. Journal of Computational Physics, 62(1), 40–65. https://doi.org/10.1016/0021-9991(86)90099-9

Khalid, A. H., Muhamad Said, M. F., Veza, I., Abas, M. A., Roslan, M. F., Abubakar, S., & Jalal, M. R. (2024). *Hydrogen port fuel injection: Review of fuel injection control strategies to mitigate backfire in internal combustion engine fuelled with hydrogen.* International Journal of Hydrogen Energy, 66, 571–581. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.04.087

Kouchi, T., Yamaguchi, S., Koike, S., Nakajima, T., Sato, M., Kanda, H., & Yanase, S. (2016). *Wavelet analysis of transonic buffet on a two-dimensional airfoil with vortex generators*. Experiments in Fluids, 57(11). https://doi.org/10.1007/s00348-016-2261-2

Lim, G., Lee, S., Park, C., Choi, Y., & Kim, C. (2013). Effects of compression ratio on performance and emission characteristics of heavy-duty SI engine fuelled with HCNG. *International Journal of Hydrogen Energy, 38*(11), 4831–4838.

Menter, F. R. (1994). *Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications.* AIAA Journal, 32(8), 1598–1605. https://doi.org/10.2514/3.12149

OpenCFD. (s.f.-b). *5.2 Thermophysical models. OpenFOAM User Guide*. Recuperado el 17 de agosto de 2026, de https://www.openfoam.com/documentation/user-guide/5-models-and-physical-properties/5.2-thermophysical-models

OpenCFD. (2022). *OpenFOAM v2212 Boundary Conditions Documentation.* ESI-OpenCFD. Recuperado el 17 de agosto de 2026, de https://doc.openfoam.com/2212/tools/processing/boundary-conditions/

Panthi, N., Garzon Alzate, A. F., Sharma, P., AlRamadan, A. S., Cenker, E., & Magnotti, G. (2026). *Direct injection hydrogen combustion under leaner conditions in an optical engine using optical/laser diagnostics.* Fuel, 407, 137432. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2025.137432

Patankar, S. V. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. *Hemisphere Publishing Corporation*.

Pope, S. B. (2013). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.

Ring, R., Stott, J., & Hales, C. (2011). *Modeling the Risk of Fire/Explosion Due to Oxidizer/Fuel Leaks in the Ares I Interstage.* NASA Marshall Space Flight Center, Bastion Technologies, Inc. NASA Technical Reports Server (NTRS). Recuperado de: https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20110004369/downloads/20110004369.pdf

Salim, M. S., Malek, M. A., & Jamiat, N. (2023). *Optimization of inverse-Prandtl of dissipation in standard k-ε turbulence model for predicting flow field of crossflow turbine.* Journal of Advanced Research in Fluid Mechanics and Thermal Sciences, 108(1), 1-15. https://doi.org/10.37934/arfmts.108.1.115

Settles, G. S., & Hargather, M. J. (2017). A review of recent developments in schlieren and shadowgraph techniques. Measurement Science and Technology, 28(4), 042001. https://doi.org/10.1088/1361-6501/aa5748

Sfriso, S., Berni, F., Leite, C. R., Breda, S., Foucher, F., Brequigny, P., Borée, J., & Fontanesi, S. (2025). *Hydrogen and ICEs: validation of a 3D-CFD approach for in-cylinder combustion simulations of ultra-lean mixtures with a focus on the combustion regime.* International Journal of Hydrogen Energy, 175(151347), 151347. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.151347

(S/f). Cfd-online.com. Recuperado el 17 de agosto de 2026, de https://www.cfd-online.com/Wiki/Favre_averaging

The OpenFOAM Foundation. (2024). OpenFOAM v12 user guide. https://openfoam.org

Traldi, E., Boselli, M., Simoncelli, E., Stancampiano, A., Gherardi, M., Colombo, V., & Settles, G. S. (2018). *Schlieren imaging: a powerful tool for atmospheric plasma diagnostic*. EPJ Techniques and Instrumentation, 5(1), 4. https://doi.org/10.1140/epjti/s40485-018-0045-1

United Nations. (s. f.). *Net Zero Coalition.* Recuperado el 27 de febrero de 2026, de https://www.un.org/es/climatechange/net-zero-coalition

Uddin, N., Kee, P. T. W., & Weigand, B. (2024). *Heat transfer by jet impingement: A review of heat transfer correlations and high-fidelity simulations.* Applied Thermal Engineering, 257, 124258. https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.124258

Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method (2.ª ed.).* Pearson Prentice Hall.

WWF Colombia. (s. f.). *El gran reto de alcanzar la carbono-neutralidad en el 2050 y lograr una transición energética*. Recuperado el 27 de febrero de 2026, de https://www.wwf.org.co/?380775/Neutralidad-de-carbono-y-transicion-energetica-en-Colombia-para-2050

Yang, Z., Wu, J., Yun, H., Zhang, H., & Xu, J. (2022). *Diagnosis and control of abnormal combustion of hydrogen internal combustion engine based on the hydrogen injection parameters. International Journal of Hydrogen Energy*, *47*(35), 15887–15895. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.03.031

Yeganeh, M., Akram, M. S., Cheng, Q., Karimkashi, S., Kaario, O., & Larmi, M. (2024). *Experimental study of hydrogen jet dynamics: Investigating free momentum and impingement phenomena.* International Journal of Hydrogen Energy, 68, 1423–1437. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.04.296

Zhao, Z., Zhao, C., Huang, Y., Zhao, Q., Wang, C., Li, J., & Guo, Y. (2022). *Facilitating layered oxide cathodes based on orbital hybridization for sodium-ion batteries: Marvelous air stability, controllable high voltage, and anion redox chemistry.* Advanced Functional Materials, 32(35), 2203774. https://doi.org/10.1002/adfm.202203774

ANEXOS

Anexo A. Configuración caso de validación (BP=150 kPa, NPR=3.10)

A.1 blockMeshDict

```
FoamFile
{
format      ascii;
class       dictionary;
object      blockMeshDict;
}
scale   0.001;
// ============================================================
// MALLA OPTIMIZADA v3 - H2_injection_v3
// Caso: 800 kPa(g), Pt=779186 Pa, NPR=7.69
// Wedge axisimetrico 10 grados (+-5 grados)
// cos(5) = 0.99619, sin(5) = 0.08716
// Zona fina: X = 0-110mm (cubre Zt_max=102mm del paper)
// Zona gruesa: X = 110-200mm
// Justificacion: Pope (2000) Cap.5
// Total: ~4,900 celdas
// ============================================================
vertices
(
( 0    0        0        )  // v0
( 110  0        0        )  // v1
( 200  0        0        )  // v2
( 0    0.49810 -0.04358  )  // v3
( 110  0.49810 -0.04358  )  // v4
( 200  0.49810 -0.04358  )  // v5
( 0    59.771  -5.2296   )  // v6
( 110  59.771  -5.2296   )  // v7
( 200  59.771  -5.2296   )  // v8
( 0    0        0        )  // v9
```

```
( 110  0       0       )  // v10
( 200  0       0       )  // v11
( 0    0.49810  0.04358  )  // v12
( 110  0.49810  0.04358  )  // v13
( 200  0.49810  0.04358  )  // v14
( 0    59.771   5.2296   )  // v15
( 110  59.771   5.2296   )  // v16
( 200  59.771   5.2296   )  // v17
);
blocks
(
hex (0 1 4 3 9 10 13 12)
( 110 5 1 )
simpleGrading (2 1 1)
hex (1 2 5 4 10 11 14 13)
( 30 5 1 )
simpleGrading (1 1 1)
hex (3 4 7 6 12 13 16 15)
( 110 30 1 )
simpleGrading (2 8 1)
hex (4 5 8 7 13 14 17 16)
( 30 30 1 )
simpleGrading (1 8 1)
);
edges
(
);
boundary
(
inlet
{
type patch;
faces ( (0 3 12 9) );
}
```

```
wall_injector
{
type wall;
faces ( (3 6 15 12) );
}
outlet
{
type patch;
faces
(
(2 5 14 11)
(5 8 17 14)
);
}
wall_top
{
type wall;
faces
(
(6 7 16 15)
(7 8 17 16)
);
}
axis
{
type empty;
faces
(
(0 1 10 9)
(1 2 11 10)
);
}
wedge_neg_1 { type wedge; faces ( (0 1 4 3) ); }
wedge_neg_2 { type wedge; faces ( (1 2 5 4) ); }
```

```
wedge_neg_3 { type wedge; faces ( (3 4 7 6) ); }
wedge_neg_4 { type wedge; faces ( (4 5 8 7) ); }
wedge_pos_1 { type wedge; faces ( (9 10 13 12) ); }
wedge_pos_2 { type wedge; faces ( (10 11 14 13) ); }
wedge_pos_3 { type wedge; faces ( (12 13 16 15) ); }
wedge_pos_4 { type wedge; faces ( (13 14 17 16) ); }
);
mergePatchPairs
(
);
```

A.2 physicalProperties

```
FoamFile
{
format      ascii;
class       dictionary;
object      physicalProperties;
}
thermoType
{
type            hePsiThermo;
mixture         multicomponentMixture;
transport       sutherland;
thermo          janaf;
energy          sensibleEnthalpy;
equationOfState perfectGas;
specie          specie;
}
defaultSpecie Air;
#include "thermo.compressibleGas"
```

A.3 momentumTransport

```
/*--------------------------------*- C++ -*----------------------------------*\
  =========                 |
  \\      /  F ield         | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
   \\    /   O peration     | Version: 12
    \\  /    A nd           | Web: www.openfoam.org
     \\/     M anipulation  |
\*---------------------------------------------------------------------------*/
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       dictionary;
    object      momentumTransport;
}

// ============================================================
// Modelo de turbulencia: k-omega SST (RANS)
// Seleccionado por:
// - Maneja bien chorros libres compresibles
// - Combina k-omega cerca de paredes y k-epsilon lejos
// - Validado ampliamente para inyeccion de gases
// Referencia: Menter (1994), Pope (2000)
// ============================================================
simulationType  RAS;

RAS
{
    model           kOmegaSST;
    turbulence      on;
    printCoeffs     on;
}
```

A.4 Condiciones de frontera (0/)

A.4.1 p (Presión)

```
FoamFile
{
   format      ascii;
   class       volScalarField;
   object      p;
}
dimensions      [1 -1 -2 0 0 0 0];
internalField   uniform 251325;
boundaryField
{
   inlet
   {
      type           fixedValue;
      value          uniform 779186;
   }
   outlet
   {
      type           inletOutlet;
      inletValue     uniform 251325;
      value          uniform 251325;
   }
   wall_top { type zeroGradient; }
   axis { type empty; }
   wall_injector { type zeroGradient; }
   wedge_neg_1 { type wedge; }
   wedge_neg_2 { type wedge; }
   wedge_pos_1 { type wedge; }
   wedge_pos_2     { type wedge; }
   wedge_neg_3     { type wedge; }
   wedge_neg_4     { type wedge; }
```

```
    wedge_pos_3     { type wedge; }
    wedge_pos_4     { type wedge; }
}
```

A.4.2 T (Temperatura)

```
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       volScalarField;
    object      T;
}
dimensions      [0 0 0 1 0 0 0];
internalField   uniform 300;
boundaryField
{
    inlet
    {
        type            fixedValue;
        value           uniform 300;
    }
    outlet
    {
        type            inletOutlet;
        inletValue      uniform 300;
        value           uniform 300;
    }
    wall_top { type zeroGradient; }
    axis { type empty; }
    wall_injector { type zeroGradient; }
    wedge_neg_1 { type wedge; }
    wedge_neg_2 { type wedge; }
    wedge_pos_1 { type wedge; }
    wedge_pos_2     { type wedge; }
```

```
    wedge_neg_3     { type wedge; }
    wedge_neg_4     { type wedge; }
    wedge_pos_3     { type wedge; }
    wedge_pos_4     { type wedge; }
}
```

A.4.3 U (Velocidad)

```
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       volVectorField;
    object      U;
}
dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];
internalField   uniform (0 0 0);
boundaryField
{
    inlet
    {
        type            uniformFixedValue;
        uniformValue    table
        (
            (0        (0 0 0))
            (1e-5     (1314.5 0 0))
            (0.002    (1314.5 0 0))
        );
    }
    wall_injector { type zeroGradient; }
    outlet { type pressureInletOutletVelocity; value uniform (0 0 0); }
    wall_top { type noSlip; }
    axis { type empty; }
    wedge_neg_1 { type wedge; }
    wedge_neg_2 { type wedge; }
```

```
    wedge_neg_3 { type wedge; }
    wedge_neg_4 { type wedge; }
    wedge_pos_1 { type wedge; }
    wedge_pos_2 { type wedge; }
    wedge_pos_3 { type wedge; }
    wedge_pos_4 { type wedge; }
}
```

A.4.4 H2 (fracción másica H_2)

```
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       volScalarField;
    object      H2;
}
dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];
internalField   uniform 0;
boundaryField
{
    inlet { type fixedValue; value uniform 1; }
    outlet { type inletOutlet; inletValue uniform 0; value uniform 0; }
    wall_top { type zeroGradient; }
    axis { type empty; }
    wall_injector { type zeroGradient; }
    wedge_neg_1 { type wedge; }
    wedge_neg_2 { type wedge; }
    wedge_pos_1 { type wedge; }
    wedge_pos_2     { type wedge; }
    wedge_neg_3     { type wedge; }
    wedge_neg_4     { type wedge; }
    wedge_pos_3     { type wedge; }
    wedge_pos_4     { type wedge; }
}
```

A.4.5 Aire (fracción másica aire)

```
FoamFile
{
   format      ascii;
   class       volScalarField;
   object      Air;
}
dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];
internalField   uniform 1;
boundaryField
{
   inlet { type fixedValue; value uniform 0; }
   outlet { type inletOutlet; inletValue uniform 1; value uniform 1; }
   wall_top { type zeroGradient; }
   axis { type empty; }
   wall_injector { type zeroGradient; }
   wedge_neg_1 { type wedge; }
   wedge_neg_2 { type wedge; }
   wedge_pos_1 { type wedge; }
   wedge_pos_2     { type wedge; }
   wedge_neg_3     { type wedge; }
   wedge_neg_4     { type wedge; }
   wedge_pos_3     { type wedge; }
   wedge_pos_4     { type wedge; }
}
```

A.4.6 k (energía cinética turbulencia)

```
FoamFile
{
   format      ascii;
   class       volScalarField;
   object      k;
}
```

```
dimensions      [0 2 -2 0 0 0 0];
internalField   uniform 0.001;
boundaryField
{
   inlet { type fixedValue; value uniform 0.01; }
   outlet { type inletOutlet; inletValue uniform 0.001; value uniform 0.001; }
   wall_top { type kqRWallFunction; value uniform 0.001; }
   axis { type empty; }
   wall_injector { type zeroGradient; }
   wedge_neg_1 { type wedge; }
   wedge_neg_2 { type wedge; }
   wedge_pos_1 { type wedge; }
   wedge_pos_2     { type wedge; }
   wedge_neg_3     { type wedge; }
   wedge_neg_4     { type wedge; }
   wedge_pos_3     { type wedge; }
   wedge_pos_4     { type wedge; }
}
```

A.4.7 omega (disipación específica)

```
FoamFile
{
   format      ascii;
   class       volScalarField;
   object      omega;
}
dimensions      [0 0 -1 0 0 0 0];
internalField   uniform 1.0;
boundaryField
{
   inlet { type fixedValue; value uniform 1000; }
   outlet { type inletOutlet; inletValue uniform 1.0; value uniform 1.0; }
   wall_top { type omegaWallFunction; value uniform 1.0; }
```

```
    axis { type empty; }
    wall_injector { type zeroGradient; }
    wedge_neg_1 { type wedge; }
    wedge_neg_2 { type wedge; }
    wedge_pos_1 { type wedge; }
    wedge_pos_2     { type wedge; }
    wedge_neg_3     { type wedge; }
    wedge_neg_4     { type wedge; }
    wedge_pos_3     { type wedge; }
    wedge_pos_4     { type wedge; }
}
```

A.5 fvSchemes

```
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       dictionary;
    object      fvSchemes;
}
ddtSchemes
{
    default         Euler;
}
gradSchemes
{
    default         Gauss linear;
    grad(U)         Gauss linear;
}
divSchemes
{
    default             none;
    div(phi,U)          Gauss upwind;
    div(phi,Yi_h)       Gauss upwind;
    div(phi,Yi)         Gauss upwind;
    div(phi,H2)         Gauss upwind;
    div(phi,h)          Gauss upwind;
    div(phi,e)          Gauss upwind;
    div(phi,K)          Gauss upwind;
    div(phi,Ek)         Gauss upwind;
    div(phi,k)          Gauss upwind;
    div(phi,omega)      Gauss upwind;
    div(phiv,p)         Gauss upwind;
    div(phid,p)         Gauss upwind;
    div(phi,(p|rho))    Gauss upwind;
```

```
    div(phi,hB)         Gauss upwind;
    div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U))))) Gauss linear;
}
laplacianSchemes
{
    default         Gauss linear corrected;
}
interpolationSchemes
{
    default         linear;
}
snGradSchemes
{
    default         corrected;
}
wallDist
{
    method          meshWave;
}
```

A.6 fvSolution

```
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       dictionary;
    object      fvSolution;
}

solvers
{
    p
    {
        solver          GAMG;
        smoother        GaussSeidel;
        tolerance       1e-06;
        relTol          0.05;
    }

    pFinal
    {
        $p;
        relTol          0;
    }

    "(rho|rhoFinal)"
    {
        solver          diagonal;
        tolerance       1e-6;
        relTol          0;
    }

    "(U|h|e|k|omega|H2|Air|Yi).*"
```

```
    {
        solver          PBiCGStab;
        preconditioner  DILU;
        tolerance       1e-7;
        relTol          0;
        minIter         1;
        maxIter         50;
    }
}
PIMPLE
{
    momentumPredictor       yes;
    nOuterCorrectors        1;
    nCorrectors             2;
    nNonOrthogonalCorrectors 0;
    transonic               yes;
    rDeltaTSmoothingCoeff   0.005;
    rDeltaTDampingCoeff     0.02;
}
relaxationFactors
{
    equations
    {
        U               1.0;
        h               1.0;
        k               1.0;
        omega           1.0;
        H2              1.0;
        Air             1.0;
    }
}
```

A.7 controlDict

```
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       dictionary;
    object      controlDict;
}
application     foamRun;
solver          multicomponentFluid;
startFrom       startTime;
startTime       0;
stopAt          endTime;
endTime         0.002;
deltaT          1e-7;
adjustTimeStep  on;
maxCo           0.2;
maxDeltaT       1e-9;
writeControl    adjustableRunTime;
writeInterval   5e-06;
writeFormat     ascii;
writePrecision  12;
purgeWrite      0;
runTimeModifiable yes;

functions
{
    #include "probes"
}
```