



UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO, CHILE

**ESTUDIO COMPUTACIONAL DE MEZCLAS DE
HIDRÓGENO CON IMPUREZAS BAJO
COMPRESIÓN RÁPIDA**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERA CIVIL MECÁNICA

JAVIERA PAZ ESPINOZA MORALES

PROFESOR GUÍA: PHD. CHRISTOPHER COOPER
PROFESOR CORREFERENTE: PHD. GERMÁN AMADOR

AGOSTO, 2025

Índice

| | |
|--|-----------|
| Índice de Figuras | 4 |
| 2. Introducción | 8 |
| 3. Objetivo general | 9 |
| 3.1. Objetivos específicos | 9 |
| 4. Estado del arte | 10 |
| 4.1. Contexto mundial y nacional | 10 |
| 4.2. El hidrógeno como combustible | 11 |
| 4.3. Formulación termodinámica y ecuaciones de movimiento del fluido | 12 |
| 4.3.1. Ecuación de estado | 12 |
| 4.3.2. Ley de mezcla para C_p en mezclas gaseosas | 12 |
| 4.3.3. Propiedades térmicas: conductividad y difusividad térmica | 13 |
| 4.3.4. Ecuaciones de Navier-Stokes | 14 |
| 4.4. Ecuaciones de Navier-Stokes | 14 |
| 4.4.1. Ecuación de continuidad | 14 |
| 4.4.2. Ecuación de conservación de energía | 15 |
| 4.4.3. Procesos politrópicos | 15 |
| 4.5. Modelos de turbulencia | 15 |
| 4.5.1. Modelo $k - \epsilon$ | 17 |
| 4.5.2. Modelo $k - \omega$ | 18 |
| 4.6. Ecuación de transporte de especies | 18 |
| 4.7. Consideraciones del dominio computacional | 19 |
| 4.7.1. Método de los volúmenes finitos | 20 |
| 4.7.2. Mallado | 21 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 4.8. | Malla dinámica | 23 |
| 4.9. | Estabilidad y convergencia del sistema | 24 |
| 4.9.1. | Relación con la convergencia: Teorema de Lax | 24 |
| 4.9.2. | Estabilidad | 25 |
| 4.9.3. | Convergencia | 25 |
| 4.10. | Condiciones de contorno | 25 |
| 4.11. | Esquemas de acoplamiento presión-velocidad y de interpolación de presión . . | 26 |
| 4.11.1. | Algoritmo PISO | 26 |
| 4.11.2. | Esquema pressure staggering option | 27 |
| 5. | Aspectos técnicos de la implementación en Fluent | 29 |
| 6. | Validación de un modelo computacional mediante la literatura | 32 |
| 6.1. | Diseño experimental | 32 |
| 6.2. | Especificaciones numéricas | 33 |
| 6.2.1. | Condiciones de frontera y configuración del dominio | 33 |
| 6.3. | Resultados | 34 |
| 6.3.1. | Curva de presión | 34 |
| 6.3.2. | Curva de temperatura | 36 |
| 6.3.3. | Análisis del modelo aplicado | 38 |
| 7. | Modelación del fenómeno de compresión rápida mediante datos experimentales | 39 |
| 7.1. | Diseño experimental | 39 |
| 7.1.1. | Descripción de la máquina | 39 |
| 7.1.2. | Geometría de la RCM y dominio computacional | 39 |
| 7.2. | Especificaciones numéricas | 40 |
| 7.2.1. | Configuración del modelo numérico | 40 |

| | | |
|--------------------|--|-----------|
| 7.3. | Justificación del tamaño de malla y cálculo de la capa térmica | 42 |
| 7.4. | Perfil de velocidad | 43 |
| 7.5. | Resultados | 45 |
| 7.5.1. | Curva de presión | 45 |
| 7.5.2. | Comparación de errores respecto a los datos experimentales | 46 |
| 7.5.3. | Curva presión–volumen (P–V) | 47 |
| 7.5.4. | Evolución del coeficiente adiabático | 48 |
| 7.5.5. | Curvas de temperatura | 49 |
| 7.5.6. | Estimación teórica de la temperatura final | 52 |
| 8. | Influencia de una impureza sólida en la transferencia de calor y autoignición | 54 |
| 8.1. | Análisis de transferencia de calor con inclusión sólida | 54 |
| 8.1.1. | Condición de continuidad en la interfaz | 54 |
| 8.1.2. | Importancia del parámetro α | 54 |
| 8.1.3. | Justificación del análisis | 55 |
| 8.2. | Configuración del dominio y estrategia de mallado | 55 |
| 8.3. | Resultados y análisis | 56 |
| 9. | Conclusiones y recomendaciones para la continuidad | 65 |
| 9.1. | Conclusiones | 65 |
| 9.2. | Recomendaciones para trabajos futuros | 66 |
| Referencias | | 68 |
| 10. Anexos | | 70 |
| 10.1. | Polinomios de capacidad calorífica a presión constante (C_p) para las especies puras | 70 |
| 10.2. | UDF utilizados | 72 |

Índice de Figuras

| | | |
|-----|--|----|
| 1. | Átomo de hidrógeno. | 11 |
| 2. | Volumen de control con vectores \vec{V} y $d\vec{A}_n$ | 20 |
| 3. | Ejemplos de mallas en 2D CFD: (a) Malla Regular y (b) Malla Irregular . . | 23 |
| 4. | Ejemplo de condición de Dirichlet en un volumen rectangular con malla irregular. | 26 |
| 5. | Ejemplo de condición de Neumann en un volumen rectangular con malla irregular. | 26 |
| 6. | Configuración de la RCM replicada a partir de Mittal et al. [11]. | 33 |
| 7. | Dominio computacional rectangular con malla estructurada y condiciones de frontera. | 33 |
| 8. | Perfil de velocidad prescrito según Mittal et al. | 34 |
| 9. | Comparación de la presión promedio de la cámara entre la simulación en Fluent y los datos experimentales de Mittal et al. [11]. | 35 |
| 10. | Error absoluto en bares entre los resultados de Mittal y la simulación realizada. | 35 |
| 11. | Comparación de la temperatura promedio de la cámara entre la simulación en Fluent y los datos experimentales de Mittal et al. [11]. | 36 |
| 12. | Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción (excluyendo la ranura) en distintos instantes después del final de la compresión, caso laminar de Mittal. | 37 |
| 13. | Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción (excluyendo la ranura) en distintos instantes después del final de la compresión, caso laminar de Mittal, sin considerar t_{wall} en la representación. | 38 |
| 14. | Configuración de la RCM del experimento. | 39 |
| 15. | Esquema del dominio computacional de la RCM sin crevice lateral. | 40 |
| 16. | Comparación entre el perfil de velocidad experimental y el perfil idealizado. . | 45 |

| | | |
|-----|---|----|
| 17. | Comparación de la evolución temporal de la presión entre la curva experimental y las simulaciones laminar y $k-\omega$. Se incluyen áreas de error para cada caso. | 46 |
| 18. | Comparación log-log entre curvas P–V simuladas (laminar y $k-\omega$ SST) y la trayectoria politrópica ideal. | 48 |
| 19. | Evolución temporal del coeficiente adiabático $\gamma(t)$ para ambos modelos. . . . | 48 |
| 20. | Evolución temporal de la temperatura promedio (T_{prom}) para ambos modelos. . . . | 49 |
| 21. | Evolución temporal de la temperatura máxima (T_{max}) para ambos modelos. . . . | 50 |
| 22. | Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes después del final de la compresión (caso laminar). | 50 |
| 23. | Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes después del final de la compresión (caso laminar con malla refinada). | 51 |
| 24. | Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes después del final de la compresión (Caso $k-\omega$). | 52 |
| 25. | Dominio computacional con malla gruesa exterior y refinamiento irregular en la vecindad de la partícula. | 56 |
| 26. | Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes posteriores al final de la compresión, para una partícula de cobre a $T = 318$ [K]. | 57 |
| 27. | Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes posteriores al final de la compresión, para una partícula de cobre a $T = 400$ [K]. | 58 |
| 28. | Comparación de los campos de temperatura simulados con tres partículas de cobre más pequeñas, ubicadas en la misma región. | 59 |
| 29. | Evolución de la temperatura en la cámara principal para los casos con y sin partícula de cobre. Se incluye una comparación entre la partícula a $T_0 = 318$ [K] y $T_0 = 400$ [K]. | 59 |

| | |
|--|----|
| 30. Zoom de la evolución de la temperatura promedio en la cámara principal para los casos con y sin partícula de cobre. Se incluye una comparación entre la partícula a $T_0 = 318\text{[K]}$ y $T_0 = 400\text{[K]}$ | 60 |
| 31. Zoom de la evolución de la temperatura promedio en la cámara principal para los casos sin partícula de cobre, con una, y con tres. | 60 |
| 32. Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes posteriores al final de la compresión, para una partícula de aluminio a $T = 318\text{[K]}$ | 61 |
| 33. Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes posteriores al final de la compresión, para una partícula de cobre a $T = 400\text{[K]}$ | 61 |
| 34. Comparación de los campos de temperatura simulados con tres partículas de aluminio más pequeñas, ubicadas en la misma región. | 62 |
| 35. Zoom de la evolución de la temperatura promedio en la cámara principal para los casos con y sin partícula de aluminio. Se incluye una comparación entre la partícula a $T_0 = 318\text{[K]}$ y $T_0 = 400\text{[K]}$ | 62 |
| 36. Zoom de la evolución de la temperatura promedio en la cámara principal para los casos sin partícula de aluminio, con una, y con tres. | 63 |

Agradecimientos

Quisiera comenzar agradeciendo a Dios, porque en los momentos más difíciles, y aún cuando dudé, me dio la fuerza y esperanza necesaria para seguir adelante.

A mi papá, que, aunque siempre lo deseó, no tuvo la oportunidad de estudiar. Su sacrificio y todas aquellas noches en que durante mi infancia trabajó hasta la madrugada, fue lo que me dió la oportunidad de llegar hasta aquí y cerrar esta etapa. Nunca partí de cero: construí mi vida sobre el peldaño de su esfuerzo.

A mi mamá, que estuvo a mi lado cada vez que pensé en rendirme. Su apoyo y presencia fue fundamental para seguir adelante. Ese respaldo constante y lleno de cariño significó más de lo que puedo poner en palabras.

A mi abuela, que probablemente aún no sabe qué fue lo que estudié. Ni el dolor de sus manos detuvo que cada domingo que visité Talca, me enviara churrascas para recordarme que mi hogar siempre me acompañaba.

A mis amigos: Rodri, Mati, Joaco, Juan Pedro y a mi novio, por su compañía y apoyo constante durante todo este proceso universitario. Gracias por escucharme incluso cuando no entendía ni yo lo que decía, y por acompañarme a pensar con paciencia los pasos a seguir. Me llevo cada uno de esos momentos en el corazón.

A mi profesor de física del liceo, Jonathan Lastra, quien una vez, en una conversación casual, comentó que había pensado en estudiar Ingeniería Mecánica. Ese comentario, junto con la pasión con la que enseñaba física, fue lo que me llevó a elegir esta profesión.

Al profesor Christopher Cooper, por tomar este trabajo a mitad de camino, cuando más necesitaba guía y respaldo.

Al DIMEC y a todos sus profesores, cuyas trayectorias han sido una fuente de inspiración y han influido profundamente en las decisiones que estoy por tomar hacia el futuro.

A mi gata Mermelada, a quien le prometí que algún día nos convertiríamos en ingenieras. Espero te avisen en el cielo.

Y a todas las personas con quienes crucé una palabra en este recorrido. Los cafés, las conversaciones y las risas compartidas también forman parte de este logro. Todo eso influyó en quien soy hoy.

2. Introducción

El estudio del comportamiento térmico y dinámico de mezclas gaseosas durante procesos de compresión rápida resulta crucial en aplicaciones donde ocurre ignición. En el contexto actual, marcado por la necesidad de transitar hacia sistemas energéticos más sostenibles, se intensifica la búsqueda de combustibles alternativos que permitan satisfacer la demanda global sin comprometer el medioambiente. En este escenario, el hidrógeno ha emergido como uno de los principales candidatos para dicha transición energética, especialmente en países como Chile, que posee condiciones óptimas para su producción a gran escala.

Dentro de este marco, las máquinas de compresión rápida (RCM, por sus siglas en inglés) se han consolidado como herramientas experimentales clave para el estudio del inicio de la combustión en condiciones bien controladas de presión, temperatura y composición de la mezcla [19, 11]. Estas máquinas permiten replicar de manera precisa las condiciones termodinámicas del ciclo de compresión de un motor real, eliminando la complejidad asociada a procesos como la inyección de combustible o la turbulencia inducida por geometrías móviles.

No obstante, en entornos reales de compresión no se alcanzan condiciones perfectamente homogéneas. La presencia de impurezas, partículas sólidas o gradientes térmicos puede perturbar el campo de temperatura, generando zonas localmente más calientes o frías, lo que a su vez puede acelerar o retrasar el inicio de la autoignición. Este fenómeno cobra especial relevancia en mezclas con hidrógeno, dada su baja energía de ignición, lo que lo vuelve particularmente sensible a cualquier irregularidad térmica o estructural, incluso en concentraciones reducidas. La comprensión de estos efectos es fundamental para avanzar hacia combustibles más limpios [1].

En el presente estudio, se evalúa la viabilidad de resolver numéricamente los campos de velocidad y temperatura en torno a una impureza microscópica suspendida en una mezcla gaseosa con bajo contenido de hidrógeno sometida a compresión rápida. Para ello, se valida el modelo numérico mediante la comparación con curvas de presión y velocidad obtenidas experimentalmente en una máquina de compresión rápida de doble pistón. Posteriormente, se analizan dos configuraciones: con y sin la presencia de partículas sólidas. Este enfoque permite estudiar, bajo condiciones controladas, la influencia térmica y dinámica de una partícula sólida sobre la evolución de la mezcla, aportando evidencia cuantitativa para la comprensión de fenómenos clave en la combustión avanzada.

3. Objetivo general

- Estudiar, mediante modelos computacionales, el proceso de transferencia de calor entre la mezcla de combustión y las impurezas microscópicas presentes, analizando su impacto en las propiedades térmicas del sistema.

3.1. Objetivos específicos

- Validar el modelo computacional de compresión de una mezcla de hidrógeno en una máquina de compresión rápida a partir de datos disponibles en la literatura.
- Modelar computacionalmente el fenómeno de compresión rápida utilizando datos experimentales.
- Analizar el fenómeno estudiado previamente incorporando una impureza esférica con el fin de comprender los procesos de transferencia de calor asociados.
- Cuantificar la influencia de la impureza en el fenómeno de autoignición.

4. Estado del arte

4.1. Contexto mundial y nacional

El cambio climático

En el planeta, los cambios de temperatura y los patrones climáticos pueden atribuirse tanto a procesos naturales como antropogénicos. Con la Revolución Industrial en el siglo XIX, la humanidad inició una era de producción a gran escala que facilitó significativamente la vida del hombre promedio. No obstante, la industrialización ha dado lugar a la creación de diversas máquinas que requieren primordialmente la quema de combustibles fósiles como el carbón, el petróleo y el gas, convirtiendo a la especie humana en el principal impulsor de este fenómeno.

Las constantes emisiones de gases de efecto invernadero, tales como el dióxido de carbono y el metano, han provocado que, desde el siglo XIX hasta la actualidad, la temperatura promedio de la Tierra haya aumentado en 1.1°C [15]. Se prevé que, de mantenerse el ritmo actual, esta temperatura alcance los 2.8°C al final del siglo, excediendo considerablemente el umbral de 1.5°C recomendado por la comunidad científica para mantener el planeta dentro de un rango habitable a largo plazo.

En este contexto, algunos países han decidido tomar medidas conjuntas, lo cual se materializó en el Acuerdo de París de 2015. En dicho acuerdo, los países signatarios se comprometieron a reducir gradualmente las emisiones de gases de efecto invernadero, desarrollando estrategias que se alineen con sus contextos y necesidades particulares [15].

Situación a nivel país

En la última década, Chile ha implementado planes estratégicos en áreas críticas como la disponibilidad de agua dulce, el desarrollo de ciudades sostenibles, el manejo del consumo y desechos industriales y domésticos, las emisiones de gases de efecto invernadero y la biodiversidad. El propósito de estos planes es diseñar y ejecutar acciones efectivas para mitigar de la mejor manera posible las consecuencias del cambio climático. En este contexto, se ha emprendido un esfuerzo considerable para transformar la matriz energética del país hacia una más limpia y sostenible. En la actualidad, aproximadamente el 41% de la energía suministrada al sistema interconectado chileno proviene de fuentes de energía renovables no convencionales.

Consecuentemente, el país ha identificado una oportunidad estratégica significativa: su geografía es propicia para la producción de hidrógeno verde, cuya generación, en un escenario de alta demanda, sería la más económica a nivel mundial. El hidrógeno verde se produce mediante la electrólisis del agua, un proceso que se alimenta de energías limpias. Este combustible se posiciona como una alternativa viable para reemplazar los combustibles fósiles, lo que ha promovido un avance notable en su investigación y desarrollo.

4.2. El hidrógeno como combustible

Características generales

El hidrógeno es el elemento químico más ligero y abundante en el universo. Está compuesto por un solo protón y un electrón. En su estado aislado, el hidrógeno no es estable; sin embargo, puede encontrarse en una forma más estable cuando se combina con otros elementos o consigo mismo, formando moléculas diatómicas. Este elemento es el principal combustible de las estrellas, incluyendo el sol. A través de la fusión nuclear en las estrellas, el hidrógeno se transforma en otros elementos más pesados, lo que contribuye a la formación y evolución del universo tal como lo conocemos. Sus propiedades en condiciones atmosféricas son,¹

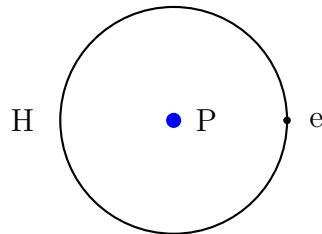


Figura 1: Átomo de hidrógeno.

| Propiedad | Valor |
|--------------------------|---------|
| Masa atómica [g/mol] | 1,00797 |
| Densidad [g/ml] | 0,071 |
| Punto de ebullición [°C] | -252,7 |
| Punto de fusión [°C] | -259,2 |

Cuadro 1: Propiedades del Hidrógeno

¹Se indican las propiedades del hidrógeno de forma ilustrativa. Las variaciones de ellas en base a la temperatura se calcularán posteriormente.

En términos físicos, es un gas insípido, incoloro e inodoro. Químicamente, se caracteriza por tener un punto de ebullición y fusión muy bajos, lo que explica su estado natural como gas. Comparado con otros combustibles, el hidrógeno tiene una temperatura de autoignición promedio; sin embargo, su energía de ignición es notablemente baja, comparable a lo que un pequeño gradiente de temperatura puede entregar, lo que lo convierte en un elemento difícil de manejar.

| Propiedades | Hidrógeno | Amoníaco | Gas Natural | Metanol |
|---|-----------|------------|-------------|-------------|
| Temperatura de autoignición (K) | 858 [11] | 930 [16] | 923 [11] | 712 [16] |
| Límites de inflamabilidad en aire (vol %) (LFL-UFL) | 4-75 [11] | 16-25 [17] | 5-15 [11] | 7.3-36 [17] |
| Energía mínima de ignición (mJ) | 0.02 [11] | 8 [16] | 0.28 [11] | 0.14 [16] |

Cuadro 2:

Comparación de las propiedades del hidrógeno, amoníaco, gas natural y metanol ($T = 300$ [K], $P = 1$ [atm]).

4.3. Formulación termodinámica y ecuaciones de movimiento del fluido

Entre las ecuaciones importantes para el estudio se encuentran,

4.3.1. Ecuación de estado

La ecuación de estado utilizada en el presente trabajo corresponde a la ley de los gases ideales, que relaciona la presión, el volumen y la temperatura mediante:

$$PV = nRT \quad (1)$$

Donde es la presión, el volumen, el número de moles, la constante universal de los gases y la temperatura. Esta aproximación resulta válida para gases ligeros y a presiones moderadas, condiciones que coinciden con las utilizadas en las simulaciones.

4.3.2. Ley de mezcla para C_p en mezclas gaseosas

En mezclas de gases ideales, la capacidad calorífica a presión constante de la mezcla se puede calcular utilizando una ley de mezcla ponderada por fracción molar, la cual considera el aporte individual de cada especie:

$$C_{p,\text{mezcla}} = \sum_i y_i C_{p,i} \quad (2)$$

Donde:

- y_i es la fracción molar de la especie i ,
- $C_{p,i}$ es la capacidad calorífica a presión constante de la especie i .

Este enfoque se justifica bajo la hipótesis de gas ideal, donde las interacciones entre moléculas de distintas especies son despreciables, y el comportamiento energético se puede modelar como la suma de los aportes individuales. Esta formulación es ampliamente aceptada y utilizada en simulaciones CFD para determinar propiedades termodinámicas de mezclas gaseosas.

4.3.3. *Propiedades térmicas: conductividad y difusividad térmica*

Para describir la transferencia de calor en un medio fluido, se considera la **conductividad térmica** k , que cuantifica la capacidad del material para conducir calor. Esta propiedad está relacionada con la **difusividad térmica** α , definida como:

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p} \quad (3)$$

donde:

- k es la conductividad térmica del material [W/m · K],
- ρ es la densidad del gas [kg/m³],
- C_p es la capacidad calorífica a presión constante [J/kg · K].

Esta expresión permite interpretar α como una medida de la rapidez con la que un cuerpo puede ajustarse térmicamente a su entorno. En otras palabras, una mayor difusividad térmica implica una transmisión más eficiente del calor dentro del dominio.

En el caso de mezclas gaseosas, los valores de k , ρ y C_p pueden variar espacial y temporalmente, por lo que es habitual determinar α de forma local a partir de los campos de solución en las simulaciones CFD. Esta aproximación es especialmente relevante al estudiar la influencia de cuerpos sólidos dentro de la mezcla (como partículas), ya que presentan propiedades térmicas significativamente distintas que el fluido circundante.

4.3.4. Ecuaciones de Navier-Stokes

4.4. Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier–Stokes describen el movimiento de los fluidos y son fundamentales en la dinámica de fluidos. Estas ecuaciones derivan del principio de conservación de la cantidad de movimiento, y consideran tanto las fuerzas viscosas como las de presión dentro del fluido. Para un flujo incompresible con viscosidad constante, las ecuaciones de Navier–Stokes en coordenadas cartesianas se simplifican de la siguiente manera:

$$\boxed{\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}} \quad (4)$$

Cuando se considera un fluido **comprimible**, las ecuaciones de Navier–Stokes ya no pueden asumir densidad constante, por lo que deben expresarse en su forma más general. En este caso, el término de divergencia del tensor de esfuerzos viscosos se ajusta para incorporar los efectos de dilatación volumétrica. La ecuación resultante, que representa la conservación de la cantidad de movimiento para un fluido comprimible newtoniano, se expresa como:

$$\boxed{\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{f}} \quad (5)$$

donde el tensor de esfuerzos viscosos $\boldsymbol{\tau}$ está definido como:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\lambda - \frac{2}{3}\mu \right) \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (6)$$

En esta expresión, μ es la viscosidad dinámica, λ es la viscosidad volumétrica (también conocida como segundo coeficiente de viscosidad) y δ_{ij} es el delta de Kronecker. Esta formulación permite modelar tanto la cizalla como los efectos compresibles del fluido.

4.4.1. Ecuación de continuidad

La ecuación que expresa la conservación de la masa en un medio continuo se expresa matemáticamente como,

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0} \quad (7)$$

4.4.2. Ecuación de conservación de energía

La primera ley de la termodinámica, relacionada con la conservación de energía, escrita para un volumen de control, es la siguiente,

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e \right) + \nabla \cdot \left[\mathbf{u} \left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e + p \right) \right] = \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \mathbf{T})} \quad (8)$$

4.4.3. Procesos politrópicos

Un proceso politrópico es un tipo de proceso termodinámico en el cual la presión y el volumen de un gas se relacionan mediante una ecuación de la forma $PV^n = C$, donde n y C son constantes.

La ecuación que relaciona presión y volumen en un proceso politrópico es,

$$PV^n = C \quad (9)$$

Para el trabajo realizado durante un proceso politrópico, la expresión general es,

$$W_b = \int_1^2 P dV = \int_1^2 CV^{-n} dV \quad (10)$$

4.5. Modelos de turbulencia

La turbulencia es un fenómeno complejo que aparece en los fluidos cuando se superan ciertos límites de velocidad o existen cambios bruscos en la geometría, lo cual produce un movimiento caótico, remolinos y vórtices en el flujo. Esto se puede evidenciar mediante el número de Reynolds asociado, el cual es un número adimensional que identifica el tipo de flujo del fluido a estudiar.

En la actualidad, no existe una manera de predecir flujos turbulentos matemáticamente en forma de soluciones explícitas de Navier–Stokes u otro tipo de ecuaciones. La modelación

mediante métodos numéricos en la actualidad demanda una capacidad computacional no existente, razón por la cual los Modelos de Turbulencia han tomado fuerza.²

Flujo laminar y simulaciones DNS. El **modelo laminar** asume un flujo completamente ordenado y sin fluctuaciones turbulentas. Aunque no es un modelo de turbulencia en sí, se utiliza como referencia o en condiciones donde el flujo permanece estable (Reynolds bajos o zonas donde las dimensiones del dominio y la velocidad no inducen inestabilidad). En este caso, las ecuaciones de Navier–Stokes se resuelven directamente sin necesidad de modelos adicionales.

Sin embargo, si se resuelven las ecuaciones completas de Navier–Stokes sin aplicar modelos de turbulencia y se utilizan una malla y pasos de tiempo lo suficientemente finos como para capturar todas las escalas del flujo —incluidas las de disipación— se está frente a una **Direct Numerical Simulation** (DNS). Esta técnica permite estudiar el comportamiento físico detallado de los flujos turbulentos, pero su costo computacional es extremadamente alto, por lo que se limita generalmente a geometrías simples y flujos con Reynolds moderados.

Para que una simulación sea clasificada como DNS, debe cumplir con:

- Resolución espacial hasta la escala de Kolmogórov mediante mallas extremadamente refinadas.
- Pasos de tiempo pequeños que cumplan el criterio de estabilidad CFL para las velocidades y dimensiones locales.
- Flujo con número de Reynolds limitado, que haga viable la captura de todas las escalas relevantes.

DNS no debe confundirse con el modelo laminar, ya que este último simplemente asume que la turbulencia no está presente, mientras que en DNS la turbulencia está presente y es completamente resuelta mediante métodos numéricos.

Modelos RANS. Cuando el flujo es turbulento, pero no es viable realizar una simulación DNS, se utilizan modelos de turbulencia para estimar los efectos de las fluctuaciones sobre

²Se procederá a analizar la necesidad de implementar un modelo turbulento, dado que podría suceder que los efectos sean tan despreciables que no justifiquen su acoplamiento.

el flujo medio. Entre estos enfoques se encuentran los llamados modelos RANS (Reynolds-averaged Navier–Stokes equations), que aplican un promediado temporal o estadístico a las ecuaciones y cierran el sistema mediante modelos adicionales. Entre los más comunes se encuentran:

- **Modelos Algebraicos**, en los que la viscosidad del remolino turbulento se aproxima mediante una función algebraica del espacio, tiempo y características simples del flujo medio.
- **Modelos de dos ecuaciones**, en los cuales las escalas de velocidad y longitud de la turbulencia se determinan como soluciones de dos ecuaciones diferenciales parciales adicionales. En esta rama, se encuentra el modelo $k - \epsilon$ y el modelo $k - \omega$.

4.5.1. *Modelo $k - \epsilon$*

El modelo $k - \epsilon$ consiste en dos ecuaciones diferenciales parciales y una expresión algebraica para la ".^{eddy} viscosity", las que deben ser resueltas simultáneamente junto con las ecuaciones de conservación de masa y momentum para el flujo promedio [9].

La ecuación para la ".^{eddy} viscosity." es,

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (11)$$

La ecuación para ϵ ,

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho \langle u_j \rangle \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = C_{\epsilon 1} P_k \frac{\epsilon}{k} - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma \epsilon}) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] \quad (12)$$

La ecuación para k ,

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \langle u_j \rangle \frac{\partial k}{\partial x_j} = 2\mu_t \langle S_{ij} \rangle \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} - \rho \epsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma k}) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (13)$$

Donde los coeficientes C_x y σ_x son constantes.

4.5.2. *Modelo $k - \omega$*

El modelo $k - \omega$ también es un modelo de turbulencia basado en dos ecuaciones diferenciales parciales. Este modelo es particularmente efectivo para resolver flujos con separación y condiciones de flujo libre. Las ecuaciones que describen el modelo $k - \omega$ son las siguientes [10]:

La ecuación para la “eddy viscosity” es,

$$\mu_t = \frac{\rho k}{\omega} \quad (14)$$

La ecuación para ω ,

$$\rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho \langle u_j \rangle \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \quad (15)$$

La ecuación para k ,

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \langle u_j \rangle \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \beta^* \rho k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (16)$$

Donde los coeficientes α , β , β^* , σ_k y σ_ω son constantes específicas del modelo.

4.6. Ecuación de transporte de especies

En el presente estudio, se habilitó el modelo de transporte de especies en ANSYS Fluent, aun en simulaciones no reactivas, debido a la naturaleza multicomponente de la mezcla gaseosa empleada. Aunque no se consideran reacciones químicas entre las especies, el transporte de cada componente individual (como hidrógeno, propano, nitrógeno y argón) es fundamental para una representación precisa del sistema. Este modelo permite resolver la ecuación de conservación para cada especie, considerando los efectos de difusión y convección, lo cual resulta esencial para calcular propiedades termodinámicas variables como la capacidad calorífica específica C_p , la conductividad térmica k y la densidad ρ . Además, al tratarse de una mezcla real, la evolución de la temperatura está estrechamente ligada a la distribución espacial de las especies, lo que influye directamente en la transferencia de calor y el comportamiento dinámico del flujo. Por tanto, el modelo de especies no solo mejora la fidelidad física de la simulación, sino que es indispensable para capturar correctamente los efectos térmicos

asociados a la presencia de múltiples componentes gaseosos [2].

Cuando se activa el modelo de transporte de especies en ANSYS Fluent, se resuelve la siguiente ecuación para cada especie i :

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_{i,m} \nabla Y_i) + R_i + S_i \quad (17)$$

Donde:

- ρ es la densidad del fluido,
- Y_i es la fracción de masa de la especie i ,
- \vec{v} es el vector velocidad del flujo,
- $D_{i,m}$ es el coeficiente de difusión de la especie i en la mezcla,
- R_i representa la tasa de producción o consumo debido a reacciones químicas,
- S_i es una fuente adicional de la especie i , como por ejemplo un término definido por el usuario (UDF).

En simulaciones sin reacciones químicas, se asume $R_i = 0$, y la ecuación describe únicamente el transporte por convección y difusión.

4.7. Consideraciones del dominio computacional

En el ámbito de la mecánica, la aplicación de las leyes que rigen los fluidos, tales como la conservación de masa, la conservación de momentum y la conservación de energía, resulta compleja para la ciencia analítica en la mayoría de los problemas ingenieriles. Afortunadamente, las soluciones a estos problemas pueden ser aproximadas mediante métodos computacionales, lo que ha dado origen a la dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés).

Las aplicaciones de la CFD son variadas. Ejemplos destacados incluyen la interacción de un fluido con un vehículo, la transferencia de calor entre placas que transportan un fluido, entre otros. Por esta razón, la CFD ha adquirido una relevancia significativa en la industria, impulsando el desarrollo de herramientas de resolución científica, como el software comercial Ansys Fluent.

4.7.1. Método de los volúmenes finitos

El método de volúmenes finitos es una técnica de discretización numérica empleada para la resolución de ecuaciones diferenciales, en la cual se subdivide el dominio mediante un mallado, que puede ser de carácter regular o irregular. En cada celda del mallado, se considera una propiedad conservativa.

Esto, se puede exemplificar con la Ecuación de Transporte General,

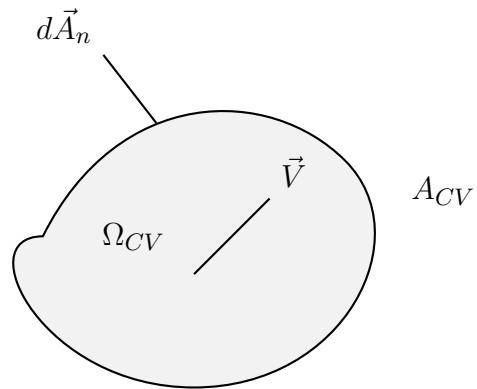


Figura 2: Volumen de control con vectores \vec{V} y $d\vec{A}_n$.

$$\frac{\partial \rho\phi}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\phi \vec{u})}_{\text{advección}} - \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)}_{\text{difusión}} = \underbrace{S_\phi}_{\text{fuente/pozo}} \quad (18)$$

Utilizando el Teorema de la Divergencia de Gauss, se obtiene,

$$\iiint_{\Omega_{CV}} \frac{\partial \rho\phi}{\partial t} d\Omega + \underbrace{\iint_{A_{CV}} \rho\phi \vec{u} \cdot \vec{n} dA_n}_{\text{advección}} - \underbrace{\iint_{A_{CV}} \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dA_n}_{\text{difusión}} = \underbrace{\iiint_{\Omega_{CV}} S_\phi d\Omega}_{\text{fuente/pozo}} \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\Omega_{CV}} \rho\phi d\Omega = - \iint_{A_{CV}} \vec{F} \cdot d\vec{A}_n + \iiint_{\Omega_{CV}} S_\phi d\Omega \quad (20)$$

Así, la ley de conservación en un elemento de volumen Ω_J del volumen total Ω_{CV} será,

$$\boxed{\frac{\partial(\rho\phi J\Omega_J)}{\partial t} + \sum_{\text{caras}} (F_i A_i)_J = (S_\phi)_J \Omega_J} \quad (21)$$

Donde $(F_i A_i)_J$ representa el flujo por unidad de área a través de cada cara del subvolumen. El flujo total del volumen Ω_{CV} se obtiene sumando los flujos que atraviesan cada una de las caras del subvolumen.

4.7.2. *Mallado*

Una de las etapas fundamentales en la simulación numérica computacional es la selección de la malla, que corresponde a la discretización del dominio espacial donde se resolverán las ecuaciones asociadas. Las mallas pueden ser regulares, con un paso espacial constante, o irregulares, con un paso espacial variable.

La calidad de la malla es un factor crítico en simulaciones numéricas, particularmente en aquellas con *malla dinámica*, donde los elementos sufren deformaciones a lo largo del tiempo. La estabilidad del solucionador, la convergencia y la precisión de los resultados dependen en gran medida de mantener métricas geométricas dentro de rangos adecuados. Las tres métricas más relevantes son:

La *skewness* o **oblicuidad** mide la desviación angular de una celda respecto a su forma ideal. En términos generales:

- Para celdas triangulares o cuadriláteras, se calcula como la desviación del ángulo entre caras con respecto al ideal (60° para triángulos, 90° para cuadrados).
- Se expresa en un rango de $[0, 1]$, donde:
 - **0** indica una celda perfecta.
 - > 0.85 se considera de mala calidad y puede causar errores de interpolación y divergencias numéricas.

En simulaciones con *remeshing*, la *skewness* es un criterio clave para decidir cuándo regenerar celdas. Si una celda excede el umbral permitido, es remallada para evitar problemas numéricos.

La **calidad ortogonal** evalúa el ángulo entre el vector normal a una cara y el vector que conecta los centroides de celdas adyacentes. Cuantifica qué tan ortogonal es el flujo entre celdas, lo cual es esencial para minimizar errores de gradiente.

- Se define entre $[0, 1]$, donde:
 - 1 indica una celda perfectamente ortogonal.
 - < 0.1 se considera crítica y puede afectar la estabilidad de la solución.

Una buena calidad ortogonal es esencial en esquemas que calculan flujos a través de caras, ya que minimiza errores de interpolación y contribuye a la conservación numérica del flujo.

El **aspect ratio** o **razón de aspecto** es la relación entre la longitud más larga y la más corta dentro de una celda. Es particularmente relevante en simulaciones donde hay *gradientes pronunciados*, como en capas límite térmicas o de velocidad.

- Un valor ideal está cercano a 1, lo que implica celdas casi cuadradas o isotrópicas.
- Valores altos (por ejemplo, > 10) pueden ser aceptables en zonas alineadas con el gradiente principal, pero son problemáticos en flujos multidireccionales.

En mallas dinámicas, el movimiento puede degradar el *aspect ratio* a lo largo del tiempo, generando celdas alargadas que requieren *smoothing* o *remeshing* para evitar pérdida de precisión.

Malla Regular

La malla regular se caracteriza por tener un paso espacial constante en todas las direcciones. Esto implica que los elementos o volúmenes de la malla, independientemente de su forma geométrica, tienen dimensiones uniformes a lo largo del dominio. La principal ventaja de utilizar una malla regular es su simplicidad tanto en la implementación como en la formulación de las ecuaciones discretizadas. Además, este tipo de malla facilita el cálculo numérico simultáneo, lo cual puede ser beneficioso en simulaciones que requieren un alto poder computacional.

Sin embargo, la desventaja de una malla regular radica en su ineficiencia para capturar detalles locales en regiones con altos gradientes. Debido a que el paso espacial es constante, no

se puede adaptar para refinar la resolución en áreas específicas sin incrementar significativamente el número total de elementos, lo que conlleva a un aumento en el costo computacional.

Malla irregular

La malla irregular permite un paso espacial variable, adaptándose a las necesidades locales del dominio. Esta flexibilidad es particularmente útil en simulaciones donde se espera que ocurran grandes variaciones en ciertas zonas, permitiendo un mayor refinamiento y precisión en esas áreas críticas sin incrementar excesivamente el costo computacional de la resolución.

El principal desafío de utilizar una malla irregular radica en su complejidad de implementación. La generación y gestión de mallas irregulares requiere algoritmos más avanzados y cuidadosos, especialmente en la formulación de las ecuaciones discretizadas y en la garantía de estabilidad y convergencia de los métodos numéricos.

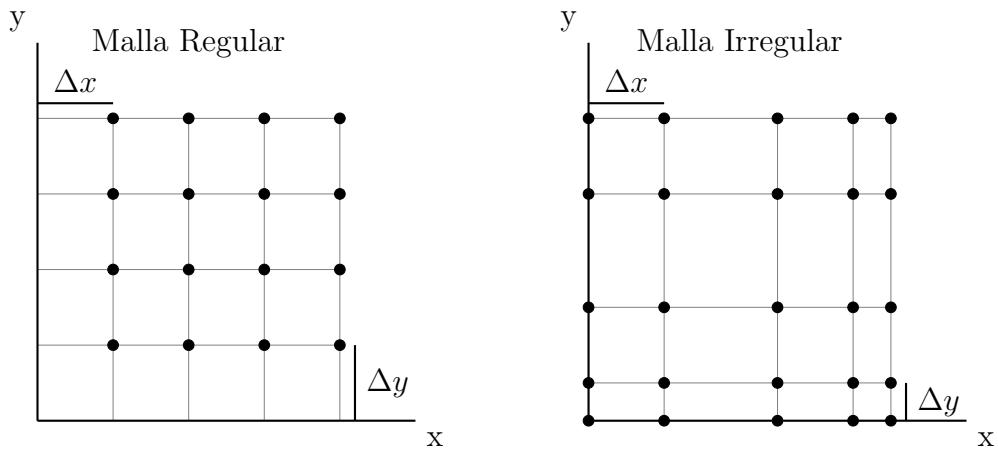


Figura 3: Ejemplos de mallas en 2D CFD: (a) Malla Regular y (b) Malla Irregular

4.8. Malla dinámica

El modelo de malla dinámica en ANSYS Fluent permite simular dominios donde una o más regiones cambian de forma o posición a lo largo del tiempo, como sucede en máquinas de compresión rápida, válvulas móviles o geometrías con superficies oscilantes.

Los principales métodos para actualizar la malla en una simulación dinámica son:

- **Smoothing:** Este método idealiza los bordes entre nodos de malla como resortes conectados, generando una red elástica que permite redistribuir los nodos internos conforme se deforman las fronteras. Se basa en un modelo de resortes de tipo lineal y su aplica-

ción es útil cuando las deformaciones son moderadas, ya que conserva la conectividad de los elementos y evita la generación de celdas degeneradas. Existen variantes como el método lineal (rápido pero menos preciso) y el método Laplaciano, que propaga las deformaciones de forma más equilibrada.

- **Layering:** Este método agrega o elimina capas de celdas en zonas prismáticas cerca de fronteras en movimiento. Se utiliza cuando la frontera se traslada de forma normal a la superficie, permitiendo insertar o quitar capas según la altura local. Es especialmente eficiente en simulaciones como la compresión de pistones, siempre que se mantenga una topología de malla apropiada (por ejemplo, estructurada o con celdas hexaédricas en capas).
- **Remeshing:** Este método agrega o elimina capas de celdas en zonas prismáticas cerca de fronteras en movimiento. Se utiliza cuando la frontera se traslada de forma normal a la superficie, permitiendo insertar o quitar capas según la altura local. Es especialmente eficiente en simulaciones como la compresión de pistones, siempre que se mantenga una topología de malla apropiada (por ejemplo, estructurada o con celdas hexaédricas en capas).

Estos métodos pueden combinarse según la complejidad de la geometría y el tipo de movimiento aplicado.

4.9. Estabilidad y convergencia del sistema

4.9.1. Relación con la convergencia: Teorema de Lax

El **teorema de Lax** establece una condición fundamental en análisis numérico:

$$\boxed{\text{Estabilidad} + \text{Consistencia} = \text{Convergencia}}$$

Esto implica que, si un esquema numérico es consistente con la ecuación diferencial y además es estable, entonces la solución discreta tenderá a la solución exacta cuando el tamaño de paso espacial $\Delta x \rightarrow 0$.

- La solución de la ecuación discreta converge a la solución de la ecuación continua al refinar la malla.

- Además, un buen método debe respetar las leyes de conservación física (como la conservación de masa, energía, etc.), especialmente importante en métodos como los de volumen finito.

4.9.2. Estabilidad

La estabilidad de un modelo representa la amplificación del error en cada paso de tiempo. Si el error se acumula, diremos que el sistema es **inestable**. A grandes rasgos, existen dos tipos de estabilidad,

- **Estabilidad débil:** El esquema es estable si la amplitud del error de redondeo no aumenta en ningún punto de la malla a medida que la solución pasa de un paso de tiempo a otro.
- **Estabilidad fuerte:** El esquema es estable si el error de redondeo general en todo el dominio espacial no crece en el tiempo.

4.9.3. Convergencia

El número de Courant-Friedrichs-Lowy, que lleva el nombre de los físicos Richard Courant, Kurt Friedrichs y Hans Lewy, es una medida de la distancia que recorre la información de una onda en una cuadrícula computacional por unidad de tiempo. En los esquemas explícitos y semi implícitos, la elección del paso de tiempo es crucial para asegurar la convergencia del esquema a una solución físicamente razonable.

$$\text{CFL} = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (22)$$

4.10. Condiciones de contorno

Condición de Dirichlet

La condición de Dirichlet es aquella que toma un valor constante en una parte o la totalidad de la frontera del volumen a estudiar.

$$f(x = 0, t) = k$$

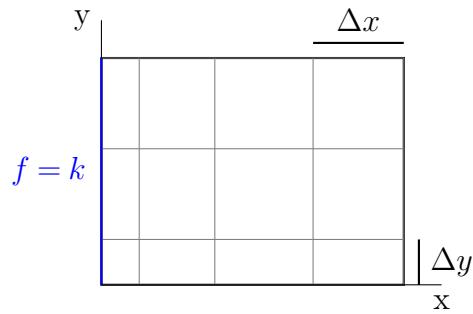


Figura 4: Ejemplo de condición de Dirichlet en un volumen rectangular con malla irregular.

Condición de Neumann

La condición de Neumann es aquella que determina un flujo constante en una parte o la totalidad del volumen a estudiar.

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x = 0, t) = k$$

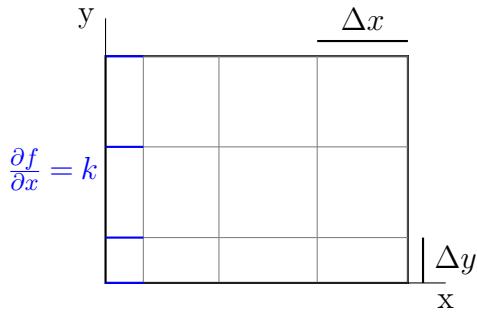


Figura 5: Ejemplo de condición de Neumann en un volumen rectangular con malla irregular.

4.11. Esquemas de acoplamiento presión-velocidad y de interpolación de presión

4.11.1. Algoritmo PISO

El algoritmo *Pressure Implicit with Splitting of Operators* (PISO) fue introducido por Issa en 1986 como una extensión del método SIMPLE para simulaciones transientes y, en general, para resolver las ecuaciones de Navier–Stokes en dominios compresibles y no estacionarios. A diferencia de otros métodos, PISO incluye múltiples correcciones de presión, lo que mejora la estabilidad numérica y acelera la convergencia sin requerir iteraciones dentro del mismo

paso de tiempo, lo cual resulta especialmente útil en simulaciones transientes como las que se desarrollan en una RCM.

El procedimiento básico del método consiste en:

1. Resolver las ecuaciones de momento para obtener una velocidad intermedia \tilde{u}_i .
2. Corregir la presión usando la ecuación de Poisson derivada de la condición de continuidad.
3. Aplicar una o más correcciones de velocidad para garantizar la conservación de masa.

Las ecuaciones utilizadas en la segunda corrección de presión y velocidad pueden representarse como:

$$\tilde{u}'_{i,P} = -\frac{\sum_l a_{l,P}(u^{(m)}) u_{i,l}}{a_p(u^{(m)})} \quad (23)$$

$$u''_{i,P} = \tilde{u}_{i,P} - \frac{1}{a_P(u^{(m)})} \left(\frac{\partial p''}{\partial x_i} \right)_P \quad (24)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{a_P(u^{(m)})} \frac{\partial p''}{\partial x_i} \right)_P = \left(\frac{\partial \tilde{u}'_i}{\partial x_i} \right)_P \quad (25)$$

4.11.2. Esquema pressure staggering option

El esquema **PRESTO!** (Pressure Staggering Option) es un método de interpolación de presión empleado en el solucionador basado en presión de ANSYS Fluent. Está diseñado para manejar de forma precisa flujos donde existen fuertes gradientes de presión o efectos rotacionales significativos. Según la Guía del Usuario de ANSYS Fluent, su uso es especialmente recomendado para:

- Flujos con altos números de remolinos (vorticidad elevada),
- Convección natural con altos números de Rayleigh,
- Flujos rotatorios de alta velocidad,
- Flujos en medios porosos,

- Dominios de flujo con geometrías altamente curvadas.

Además, es uno de los únicos esquemas permitidos al utilizar el modelo de superficie libre VOF (junto con el esquema ponderado por fuerza corporal). A diferencia de los esquemas de segundo orden, el esquema PRESTO! puede aplicarse correctamente en simulaciones con medios porosos o saltos porosos, donde otros métodos fallarían o perderían precisión.[3]

5. Aspectos técnicos de la implementación en Fluent

Para la correcta implementación de este estudio, fue necesario comprender tanto las capacidades de la herramienta de simulación empleada como las limitaciones impuestas por los recursos computacionales disponibles. A partir de esta experiencia, se establecieron los siguientes lineamientos, organizados según el flujo lógico de configuración en ANSYS Fluent, con el objetivo de facilitar la reproducción del modelo o su adaptación a estudios similares en el futuro:

- **Geometría:** La geometría se representa como un dominio 2D axisimétrico, lo que permite simplificar el problema sin comprometer la fidelidad física. Para habilitar correctamente la condición *axisymmetric* en ANSYS Fluent, el dominio debe definirse a partir del punto $(x, y) = (0, 0)$, ubicando el eje de simetría sobre el eje $x = 0$. En caso de incorporar partículas sólidas o dividir el dominio con fines de control mallado, pero manteniendo la continuidad del flujo térmico y de masa entre regiones adyacentes, es indispensable emplear una *topología compartida* en el proceso de modelado geométrico. Esto asegura la correcta transferencia de energía y propiedades a través de las interfaces internas.
- **Malla:** Para garantizar estabilidad durante la compresión, se emplea una malla predominantemente cuadrilátera, ya que este tipo de celda presenta mayor resistencia a la deformación inducida por el movimiento del pistón.

Esta malla se genera mediante la aplicación de una condición de *Face Meshing*, combinada con el método *Quad/Tri* y una configuración de malla libre cuadrilátera. Para mantener la homogeneidad del mallado, se define una condición de *uniformidad* utilizando el parámetro *Free Size*, lo que asegura una distribución regular del tamaño de celda en todo el dominio. Cabe destacar que el método *Quadrilateral Dominant* no garantiza por sí mismo dicha uniformidad, ya que solo maximiza la cantidad de celdas cuadriláteras, pudiendo generar tamaños irregulares si no se controlan adecuadamente los parámetros de mallado.

Respecto a la malla dinámica, para este estudio se optó por utilizar exclusivamente el método *layering*, ya que la combinación con *smoothing* y *remeshing* dificulta el control del dominio y puede generar volúmenes negativos. Aunque *smoothing + layering* arrojó resultados globales comparables, se identificaron inconsistencias térmicas en la zona

crítica de contacto entre la pared rígida del pistón y el eje de simetría (*axis*), lo que motivó su descarte.

Es importante destacar que, en caso de emplearse un sesgo (*bias*), este debe orientarse de modo que las celdas más grandes se ubiquen en regiones donde la velocidad del flujo es menor y los gradientes térmicos son menos pronunciados. Algunos estudios proponen una refinación en las zonas cercanas a las paredes para capturar mejor los efectos térmicos, pero esta estrategia requiere la activación del *remeshing*. Si no se desea introducir esta opción, es preferible emplear celdas más gruesas en zonas de baja velocidad, donde su impacto en los resultados es limitado. No obstante, si se utiliza únicamente *layering* para la dinámica de malla, una refinación localizada en las orillas puede inducir errores en la estimación de los efectos térmicos.

- **Representación del crevice:** Por razones de costo computacional, se simplificó la geometría de la cámara. Sin embargo, la opción de incluir el crevice es factible para estudios futuros. Se identificó que la forma más adecuada de representar esta geometría consiste en asignar una condición de *rigid body* al crevice cuando se utiliza una malla gruesa, incluyendo incluso la porción que está en contacto con la cámara, dado que físicamente esta región no sufre compresión. La única zona que debe presentar condición de *deforming* es aquella directamente conectada a la cámara principal, especialmente si se busca modelar sólo un cuarto o la mitad del dominio completo.

Cabe destacar que, incluso al referirse a una malla “gruesa”, la geometría del canal, con apenas 0.15 [mm] de alto en uno de sus extremos, exige una resolución considerable, ya que no es físicamente representativo utilizar una sola celda de altura. Por lo tanto, la modelación precisa del crevice requiere una cantidad significativa de elementos, lo cual repercute directamente en el tiempo de simulación.

- **Modelo físico:** Se activa el modelo *Species Transport* sin reacciones químicas. Esta elección es adecuada para simular mezclas de gases no reactivas, como las analizadas en este trabajo. En estudios futuros, se sugiere considerar reacciones volumétricas utilizando mecanismos como el de la Universidad de San Diego (Chemkin), que incluye 59 reacciones relevantes. En dicha base también se encuentran las ecuaciones necesarias para modelar las especies presentes en las mezclas utilizadas en este estudio. Cabe destacar que la inclusión de reacciones químicas eleva significativamente el tiempo de cálculo (hasta 15 segundos por iteración), lo cual fue considerado inviable con los recursos computacionales disponibles.

- **Movimiento del pistón:** En lugar de utilizar directamente la opción *moving wall*, se define una pared rígida con movimiento mediante un perfil de velocidad por tramos definida por un UDF.
- **Propiedades termodinámicas:** Las propiedades de las especies gaseosas (densidad, calor específico, viscosidad, etc.) se obtienen directamente de las bases de datos internas de Fluent, asumiendo un comportamiento ideal, a menos que se indique lo contrario.
- **Condiciones por defecto:** Salvo indicación contraria, se mantienen las configuraciones por defecto ofrecidas por Fluent para flexibilidad numérica, discretización y resolución de ecuaciones.

6. Validación de un modelo computacional mediante la literatura

Como paso previo a la simulación del caso de estudio principal, se replicó el experimento reportado por Mittal et al., que consiste en la compresión de una mezcla no reactiva en una máquina de compresión rápida (RCM) con geometría conocida [11]. Este procedimiento se realizó con el objetivo de validar el uso de ANSYS Fluent como herramienta adecuada para la simulación de este tipo de fenómenos transitorios y altamente compresibles.

Se mantuvieron las condiciones de contorno, la malla estructurada y el perfil de velocidad del pistón según lo descrito en dicho estudio. Asimismo, se utilizó la misma mezcla gaseosa ($H_2/O_2/N_2/Ar = 12.5/6.25/18.125/63.125$) y se compararon los campos de presión y temperatura comprimida obtenidos numéricamente con los resultados reportados. La buena concordancia entre ambos permitió confirmar la validez del enfoque de simulación adoptado.

6.1. Diseño experimental

Para la validación del modelo, se replicó la configuración de una máquina de compresión rápida (RCM) desarrollada por Mittal et al. [11]. Esta máquina cuenta con un sistema de accionamiento neumático y detención hidráulica, lo que permite un control preciso del desplazamiento del pistón. El cilindro impulsor posee un diámetro de 127 [mm], mientras que el cilindro de reacción tiene un diámetro de 50.8 [mm]. La longitud del recorrido del pistón y el volumen de holgura pueden ser modificados, lo que permite ajustar la razón de compresión según el diseño experimental. La cámara de reacción está equipada con sensores para la medición de presión y temperatura, puertos para la entrada y salida de gases, así como ventanas ópticas de cuarzo que permiten el análisis mediante técnicas ópticas avanzadas. Además, el pistón cuenta con una hendidura optimizada (crevice) diseñada para minimizar la formación de vórtices y favorecer una zona de reacción homogénea. La mezcla de gases es preparada manométricamente en un tanque presurizado con agitación magnética, garantizando su homogeneidad antes del proceso de compresión. La Figura [6] muestra un esquema representativo de dicha configuración.

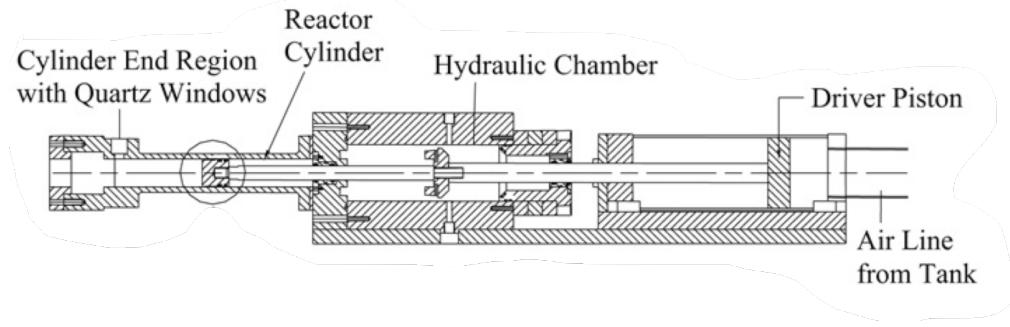


Figura 6: Configuración de la RCM replicada a partir de Mittal et al. [11].

6.2. Especificaciones numéricas

6.2.1. *Condiciones de frontera y configuración del dominio*

El dominio representa una máquina de compresión rápida (RCM) compuesta por un pistón reactor de diámetro 50.8 [mm], controlado mediante un sistema hidráulico-neumático. La geometría se modeló como axisimétrica. El recorrido del pistón fue de aproximadamente 240 [mm].

Se impusieron condiciones térmicas de temperatura en las paredes del dominio de contacto con la cámara⁷. Siguiendo lo indicado en el trabajo de referencia, en el caso de la mezcla no reactiva se eliminó el oxígeno de la composición. La mezcla inicial consistió en una combinación estequiométrica de H₂/N₂/Ar con fracciones molares de 0.125/0.307/0.568, a una temperatura de 298 K. Todas las superficies sólidas fueron modeladas bajo la condición de no deslizamiento.

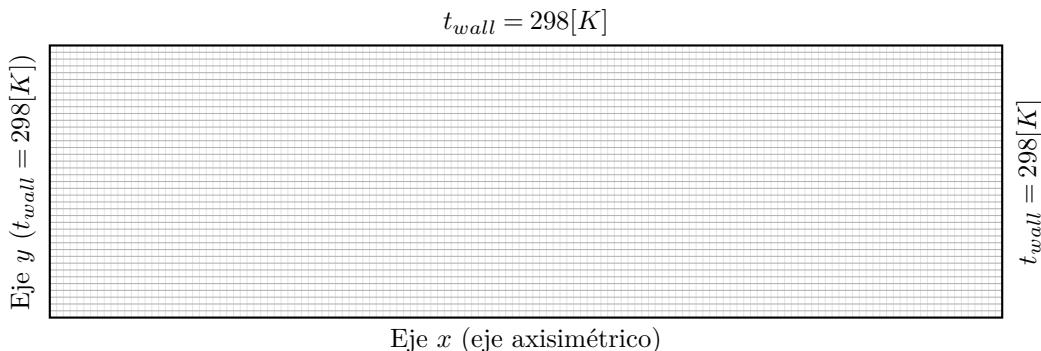


Figura 7: Dominio computacional rectangular con malla estructurada y condiciones de frontera.

Estas fracciones molares fueron seleccionadas de forma que se mantuviera el calor específico

a presión constante (c_p) de la mezcla en un valor equivalente al de la mezcla original con oxígeno, en el rango de temperatura entre 298 [K] y 900 [K], asegurando así condiciones térmicas comparables durante la simulación.

Para el movimiento del pistón se empleó únicamente el método de *layering*, con un perfil de velocidad definido mediante una función definida por el usuario (UDF), cuya forma puede observarse en la Figura [11].

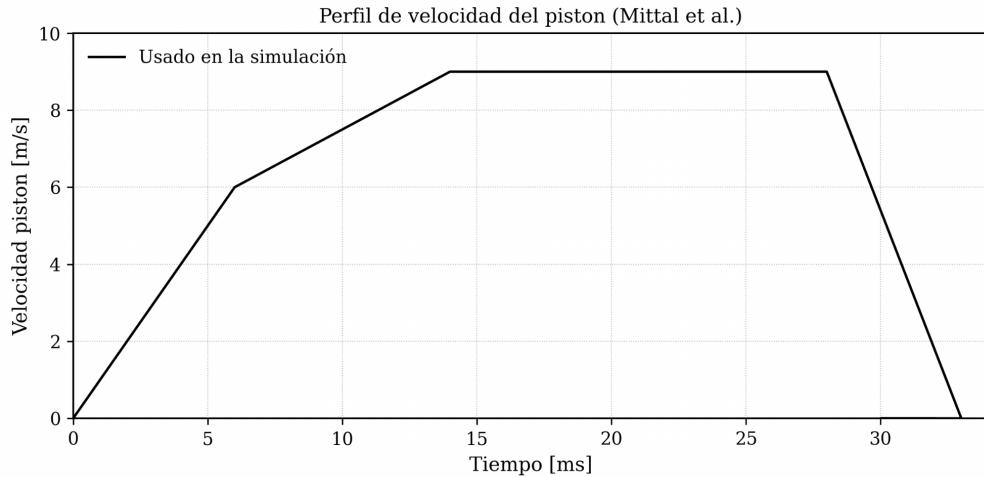


Figura 8: Perfil de velocidad prescrito según Mittal et al.

La densidad se modeló como gas ideal, y la capacidad calorífica a presión constante (c_p) se calculó a partir de los polinomios de la NASA [10.1]. El resto de las propiedades térmicas y de transporte se mantuvieron en coherencia con esta formulación.

6.3. Resultados

6.3.1. Curva de presión

La simulación se realizó en condiciones no reactivas, con una presión inicial de $P_0 = 703.5$ [torr] ≈ 0.94 [bar], temperatura de $T_0 = 298$ [K], y una mezcla estequiométrica H₂/N₂/Ar con fracciones molares de 0.125/0.307/0.568, durante un intervalo total de 33 [ms].

La figura [10] muestra la comparación entre la curva de presión obtenida en Fluent y la reconstruida del trabajo de Mittal et al. [11]. Esta última fue digitalizada mediante un software avanzado de análisis de imágenes científicas, preservando su precisión para fines comparativos.

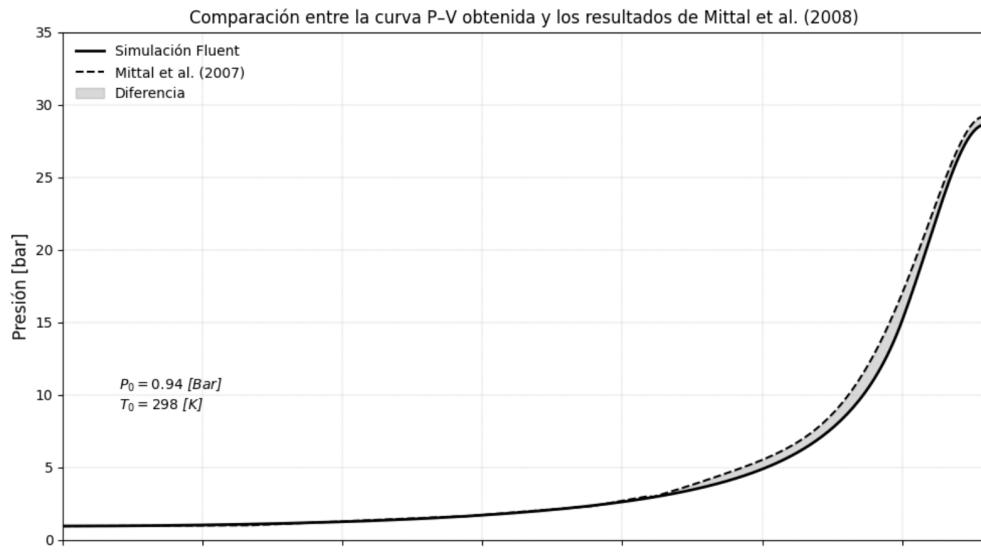


Figura 9: Comparación de la presión promedio de la cámara entre la simulación en Fluent y los datos experimentales de Mittal et al. [11].

Respecto a su error absoluto en función del tiempo, se obtiene:

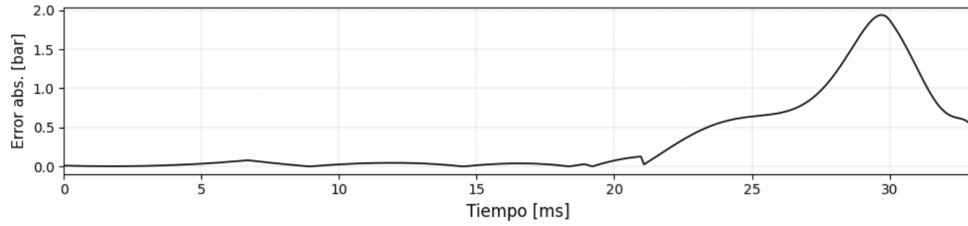


Figura 10: Error absoluto en bares entre los resultados de Mittal y la simulación realizada.

A partir de la comparación, se calculó el error absoluto promedio (MAE) y el error porcentual máximo , utilizando las siguientes expresiones:

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{p_{\text{sim}}(t_i) - p_{\text{exp}}(t_i)}{p_{\text{exp}}(t_i)} \right| \times 100 \quad (26)$$

$$\text{Error}_{\text{máx}} = \max \left(\left| \frac{p_{\text{sim}}(t_i) - p_{\text{exp}}(t_i)}{p_{\text{exp}}(t_i)} \right| \times 100 \right) \quad (27)$$

Los resultados arrojaron un MAE igual a 8.66% y un error porcentual máximo de 13.39%, el cual ocurre cerca de $t = 29.03 \text{ [ms]}$, antes de alcanzar el punto muerto superior. La diferencia

se visualiza como un sombreado gris entre ambas curvas en la figura adjunta.

6.3.2. Curva de temperatura

La Figura 11 muestra la comparación entre la curva de temperatura obtenida en Fluent y la reconstruida del trabajo de Mittal et al. [1]. Esta última, al igual que la curva de presión, fue digitalizada mediante un software avanzado de análisis de imágenes científicas, preservando su precisión para fines comparativos.

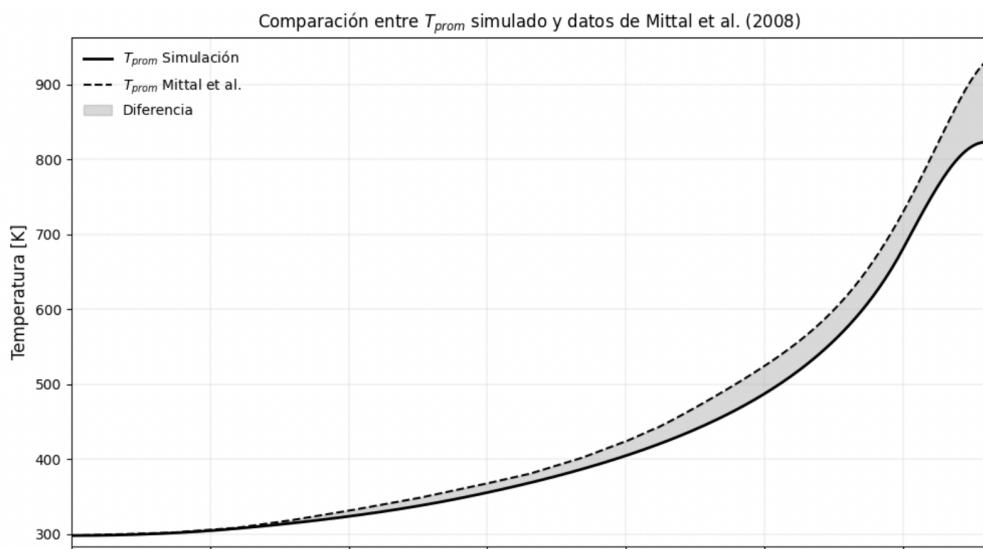


Figura 11: Comparación de la temperatura promedio de la cámara entre la simulación en Fluent y los datos experimentales de Mittal et al. [11].

La diferencia observada entre la temperatura promedio simulada y los datos reportados por Mittal puede atribuirse principalmente al tratamiento de la capacidad calorífica C_p dentro del modelo CFD. En esta simulación, C_p se calcula en función de polinomios dependientes de la temperatura para cada especie (según los coeficientes de la NASA), y luego se pondera según la fracción molar de la mezcla en cada celda. Cabe señalar que el caso no reactivo se modela sin incluir oxígeno en la mezcla, reemplazando las cantidades correspondientes por gases inertes. Sin embargo, el estudio de Mittal no especifica con exactitud qué proporciones se utilizan en dicha sustitución. Por tanto, la composición asumida en esta simulación puede inducir ligeras variaciones en el valor efectivo de C_p , lo cual impacta directamente en la evolución de la temperatura durante la compresión y constituye una posible fuente de discrepancia respecto al comportamiento experimental reportado.

En este contexto, es razonable que la temperatura promedio simulada sea ligeramente inferior. La temperatura promedio máxima obtenida en la simulación fue de $T_{\text{prom, sim}} = 807 \text{ [K]}$, mientras que el valor de referencia reportado por Mittal et al. (2008) es de $T_{\text{prom, Mittal}} = 933 \text{ [K]}$. La diferencia absoluta entre ambos valores es:

$$\Delta T = T_{\text{prom, Mittal}} - T_{\text{prom, sim}} = 933 \text{ [K]} - 807 \text{ [K]} = 126 \text{ [K]} \quad (28)$$

Esto representa un error relativo del:

$$\text{Error relativo} = \frac{\Delta T}{T_{\text{prom, Mittal}}} \times 100 = \frac{126}{807} \times 100 \approx 15.6\% \quad (29)$$

Este valor es coherente con lo esperado, considerando que una mayor capacidad calorífica promedio efectiva conduce a una menor variación de temperatura ante un mismo aporte de energía.

Respecto al campo de temperatura desarrollado mediante Fluent, se obtienen las siguientes imágenes de la cámara:

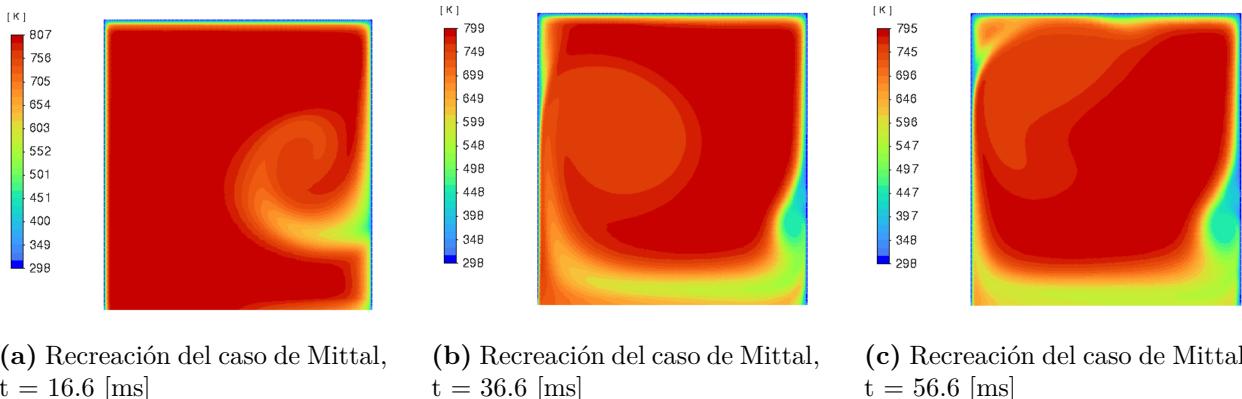
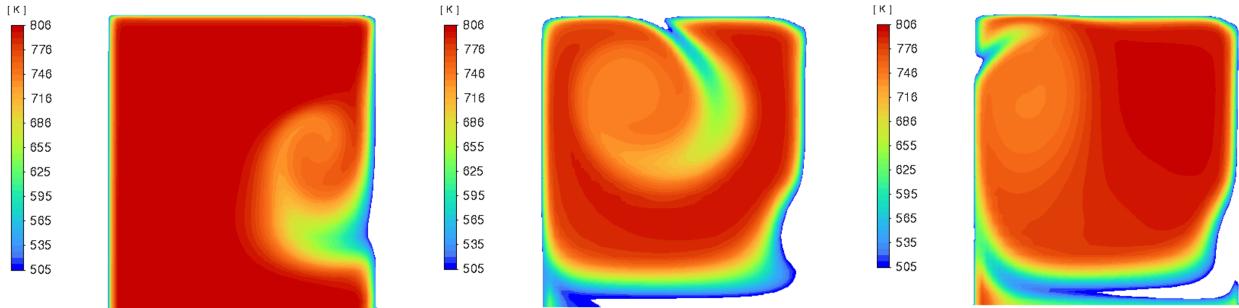


Figura 12: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción (excluyendo la ranura) en distintos instantes después del final de la compresión, caso laminar de Mittal.

En un caso con un mallado uniforme de celdas cuadriláteras de 0.1 [mm], y sin considerar las paredes en la representación, tal como se hizo en el trabajo de Mittal et al. (2008), se obtiene lo siguiente:



(a) Recreación del caso de Mittal,
 $t = 16.6$ [ms]

(b) Recreación del caso de Mittal,
 $t = 36.6$ [ms]

(c) Recreación del caso de Mittal,
 $t = 56.6$ [ms]

Figura 13: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción (excluyendo la ranura) en distintos instantes después del final de la compresión, caso laminar de Mittal, sin considerar t_{wall} en la representación.

6.3.3. Análisis del modelo aplicado

Considerando que la curva de presión obtenida muestra una concordancia significativa con los datos experimentales (presentando un error absoluto máximo inferior a 2 [bar]) y que las discrepancias observadas en la temperatura pueden atribuirse razonablemente a las diferencias en la composición de la mezcla y, por ende, a su capacidad calorífica efectiva, se concluye que el modelo resulta suficientemente válido. En consecuencia, se considera que las herramientas computacionales están siendo aplicadas de manera adecuada para la representación del fenómeno físico en estudio.

7. Modelación del fenómeno de compresión rápida mediante datos experimentales

7.1. Diseño experimental

7.1.1. Descripción de la máquina

Este sistema cuenta con dos pistones diseñados para comprimir rápidamente una mezcla gaseosa. La cámara de reacción está equipada con dispositivos de medición de presión y temperatura. Además, se incluye un diseño optimizado del pistón con hendiduras que favorece la formación de una zona de reacción homogénea, evitando los vórtices.

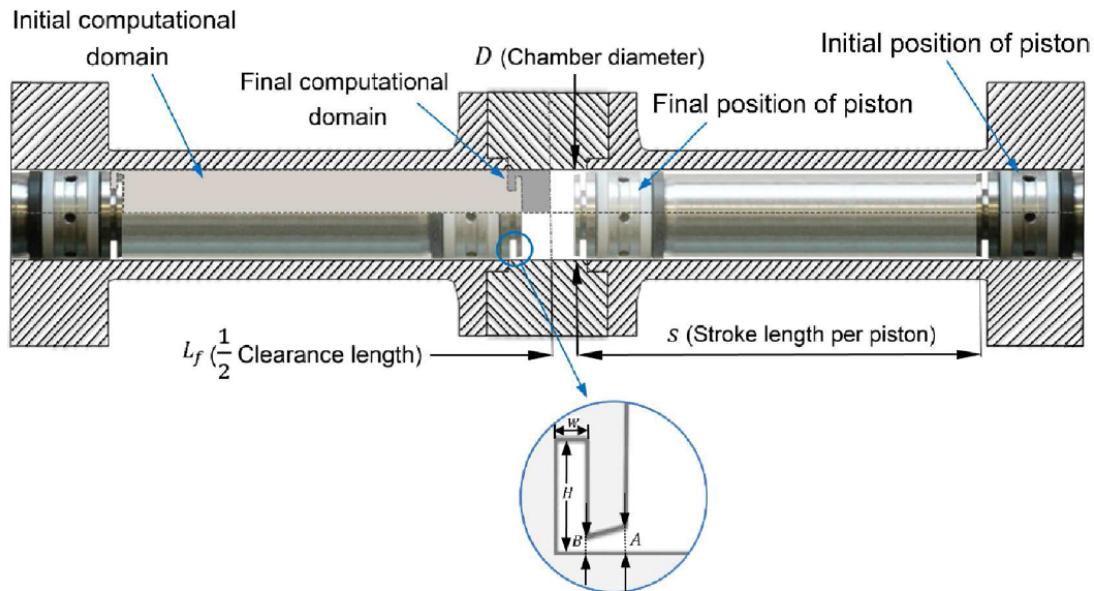


Figura 14: Configuración de la RCM del experimento.

7.1.2. Geometría de la RCM y dominio computacional

Las dimensiones internas de la RCM genérica se describen en la Figura 14, tomando como referencia la máquina desarrollada por NUI Galway. La configuración representada corresponde a una cabeza de pistón ranurada, ilustrada en sus posiciones inicial y final. En esta configuración, el diámetro interno de la cámara principal es $D = 38.2$ [mm], la carrera de cada pistón es $S = 172$ [mm], y la distancia desde el pistón hasta el plano medio es $L_f = 16.5$ [mm],

lo que representa la mitad de la holgura final. La longitud de la ranura es $W = 2.7\text{[mm]}$, con una altura de $H = 8.1\text{[mm]}$.

Con fines de simplificación, y siguiendo el enfoque adoptado por Mital et al. [[11]] en su estudio, se opta por trabajar con un modelo sin crevice.

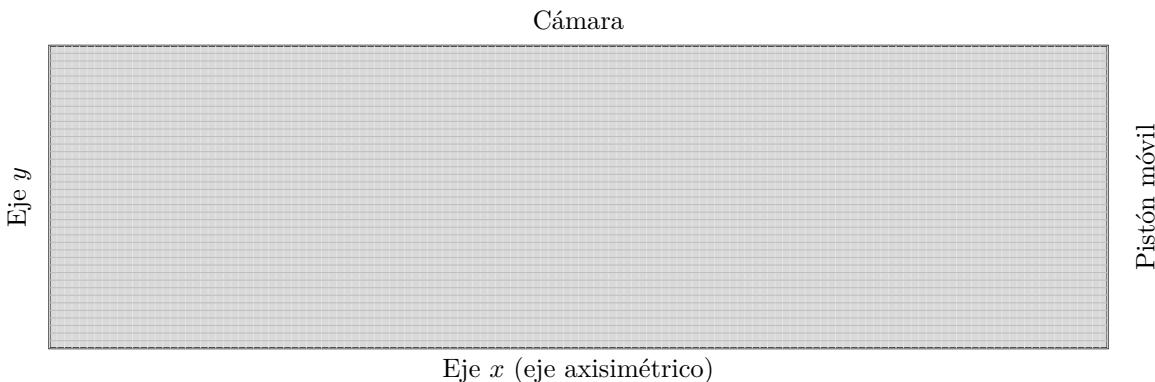


Figura 15: Esquema del dominio computacional de la RCM sin crevice lateral.

7.2. Especificaciones numéricas

7.2.1. Configuración del modelo numérico

Las simulaciones se llevaron a cabo utilizando el software **ANSYS Fluent**, sobre un dominio axisimétrico que representa un cuarto del volumen total de la cámara de la máquina de compresión rápida (RCM). La duración del proceso de compresión fue de 16.6[ms], iniciando con el pistón en reposo. Su movimiento fue prescrito mediante una **función definida por el usuario (UDF)**, basada en un perfil de velocidad idealizado que reproduce, de forma continua y controlada, las características cinemáticas del perfil experimental.

Se estudió un caso **no reactivo** con una mezcla gaseosa compuesta por Ar/N₂/H₂/C₃H₈ en proporciones molares de 0.37/0.56/0.035/0.035. La condición inicial fue homogénea en todo el dominio, con una temperatura uniforme de 318[K].

Respecto a las condiciones térmicas de contorno, se modelaron paredes de espesor nulo, permitiendo la transferencia de calor desde las paredes hacia el gas, pero no desde el gas hacia el exterior, dado que no se dispone de información suficiente para estimar dicha pérdida. En todas las superficies sólidas se impuso una condición de *no deslizamiento*.

Las propiedades termofísicas de la mezcla se evaluaron dinámicamente usando los polinomios

de la **NASA** integrados en **Fluent**, lo que permitió calcular *en función de la temperatura* propiedades como la capacidad calorífica a presión constante c_p , la conductividad térmica y la viscosidad. Se verificó que los valores obtenidos de c_p permanecieran dentro de rangos esperados, ya que su variación impacta directamente sobre la presión final y la evolución térmica en la simulación.

Respecto al modelo de malla dinámica, se utilizó layering, con los valores por defecto de colapso y división de capas: collapse ratio = 0.2 y split ratio = 0.4, pues elevarlos ocasionaba que se perdiese precisión, y disminuirlos arriesgaba riesgo de volúmenes negativos, además de un mayor costo computacional.

Se evaluaron distintos modelos de turbulencia con fines comparativos, incluyendo un modelo laminar y el modelo estándar $k-\omega$. No se utilizó el modelo $k-\epsilon$, ya que su formulación asume isotropía y desarrollos turbulentos bien establecidos, lo cual no representa adecuadamente el comportamiento del flujo transitorio, altamente comprimido y con gradientes térmicos pronunciados que se desarrolla en una RCM.

Cabe destacar que el análisis y diseño de las configuraciones actuales de cabezales ranurados (*creviced pistons*) se basan principalmente en modelos laminares [11, 19]. A la fecha, no existe evidencia experimental concluyente que respalde la superioridad de un modelo de turbulencia específico en simulaciones CFD de RCM. Por esta razón, en trabajos previos como el de Mittal et al. [11] y Yousefian et al. [19], se ha optado por no emplear modelos de turbulencia, considerando que un enfoque laminar es suficiente para capturar las principales características del fenómeno.

El paso de tiempo fue definido como **variable**, adaptado a la evolución de la velocidad del pistón y del número de Courant para garantizar estabilidad numérica y resolución de la **capa térmica**. Se respetó el criterio CFL:

$$\text{CFL} = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} < 1$$

donde u es la velocidad característica, Δt el paso de tiempo, y Δx el tamaño de celda. En el caso del uso de paso fijo, es importante considerar que el tamaño más pequeño de celda vendrá dado por el tamaño mínimo de celda multiplicado por el collapse factor. Se fijó un máximo de 50 iteraciones por paso de tiempo, usando un solver **pressure-based**, el algoritmo **PISO** para el acoplamiento presión-velocidad, esquema **PRESTO** para la presión, y discretización de segundo orden *upwind* para el momento y la energía.

Durante toda la simulación se monitorearon propiedades clave, como la evolución de c_p , la temperatura, la transferencia de calor y los residuales, con el objetivo de evaluar la sensibilidad del modelo frente a las distintas configuraciones físicas y condiciones de frontera. Estos últimos reflejaron el comportamiento típico de "diente de sierra", esperable para una malla dinámica. El error de la continuidad cayó sobre el orden de 10^{-4} , mientras que el de la energía, a 10^{-8} .

7.3. Justificación del tamaño de malla y cálculo de la capa térmica

Uno de los factores clave en la resolución numérica del fenómeno de compresión rápida es la correcta captura de la **capa térmica** que se forma en las proximidades de las paredes. Para ello, se evaluó la *difusividad térmica efectiva* de la mezcla gaseosa utilizada, compuesta por Ar/N₂/H₂/C₃H₈ en fracciones molares 0.37/0.56/0.035/0.035. Las propiedades termofísicas individuales de cada componente a 318[K] y 1[atm] se muestran en la Tabla 3.

| Componente | k [W/m · K] | c_p [J/kg · K] | M [g/mol] | ρ [kg/m ³] |
|--|---------------|------------------|-------------|-----------------------------|
| Argón (Ar) | 0.0183 | 522 | 39.95 | 1.53 |
| Nitrógeno (N ₂) | 0.0269 | 1057 | 28.01 | 1.09 |
| Hidrógeno (H ₂) | 0.1850 | 14350 | 2.016 | 0.078 |
| Propano (C ₃ H ₈) | 0.0158 | 1685 | 44.10 | 1.89 |

Cuadro 3: Propiedades termofísicas de los gases puros a 318[K]

A partir de un promedio ponderado molar, se estimaron las propiedades efectivas de la mezcla. La **conductividad térmica** calculada fue:

$$k_{\text{mezcla}} \approx 0.0301 \text{ [W/m · K]}$$

Para la **capacidad calorífica específica**:

$$c_{p,\text{mezcla}} \approx 1918 \text{ [J/kg · K]}$$

Y para la **densidad**:

$$\rho_{\text{mezcla}} \approx 1.23 \text{ [kg/m}^3\text{]}$$

Con estos valores se calculó la **difusividad térmica**:

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} = \frac{0.0301}{1.23 \cdot 1918} \approx 1.28 \times 10^{-5} [\text{m}^2/\text{s}]$$

Luego, se estimó el espesor de la capa térmica con:

$$\delta = \sqrt{\frac{\alpha \cdot t}{\pi}}$$

Para un tiempo característico de compresión de $t = 1 [\text{ms}] = 0.001 [\text{s}]$, se obtiene:

$$\delta \approx \sqrt{\frac{1.28 \times 10^{-5} \cdot 0.001}{\pi}} \approx 2.02 [\text{mm}]$$

Este valor representa el orden de magnitud del espesor que debe resolverse para capturar correctamente los gradientes térmicos durante la compresión. Por esta razón, se usaron mallas con celdas uniformes entre 0.5 [mm] y 0.1 [mm], permitiendo estudiar la sensibilidad a la resolución espacial. No se emplearon mallas irregulares debido a problemas de estabilidad y al uso de una licencia estudiantil. Se garantizó además el cumplimiento del criterio de estabilidad de Courant-Friedrichs-Lowy (CFL):

$$\text{CFL} = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} < 1$$

donde u es la velocidad característica del flujo, Δt el paso de tiempo y Δx el tamaño de celda.

Dado que la temperatura final puede superar los 800 [K], la difusividad α aumenta en consecuencia, y con ello el espesor de la capa térmica. Por lo tanto, el valor calculado a 318 [K] representa un caso conservador. Se buscó así capturar de forma precisa la evolución térmica durante el proceso completo de compresión.

7.4. Perfil de velocidad

Previo al desarrollo de las simulaciones computacionales, se llevó a cabo un análisis de los datos experimentales disponibles para verificar su coherencia física y obtener información clave del proceso de compresión. El conjunto de datos analizado incluyó registros de presión

en función del tiempo, obtenidos a partir de sensores montados en la cámara de la máquina de compresión rápida (RCM), así como posiciones promedio de los pistones durante la carrera.

Se aplicó un suavizado sobre la señal de presión utilizando un filtro de Savitzky-Golay, con el objetivo de eliminar oscilaciones no físicas y facilitar el cálculo de derivadas numéricas. A partir de la presión suavizada $P(t)$, se reconstruyó el volumen temporal $V(t)$ utilizando la expresión de compresión politrópica:

$$V(t) = V_0 \left(\frac{P_0}{P(t)} \right)^{1/\gamma}$$

donde V_0 representa el volumen inicial, P_0 la presión inicial y γ una estimación preliminar del índice politrópico, inicialmente considerado como $\gamma = 1.40$ en función de la mezcla gaseosa.

La derivación de $V(t)$ respecto al tiempo permitió estimar el perfil de velocidad del pistón experimental:

$$v(t) = -\frac{1}{A} \frac{dV}{dt}$$

donde A es el área del pistón asociada al cuarto de dominio considerado. Para reducir el ruido numérico, se aplicaron sucesivos suavizados al perfil de velocidad mediante medias móviles.

No obstante, al implementar directamente este perfil suavizado en la simulación, se observó que el volumen comprimido alcanzado era mayor al correspondiente al punto muerto superior (TDC) definido por la geometría de la máquina. Esto indicaba que numéricamente se estaba comprimiendo de más, por encima del diseño físico. Al analizar el área bajo la curva de velocidad experimental —que representa el desplazamiento total del pistón—, se obtuvo un recorrido de aproximadamente **180 [mm]**, cuando el *stroke* real de la RCM es de **172[mm]**. Es decir, un exceso del orden del **4.65 %**. Esta diferencia puede deberse a factores como:

- Errores acumulados en el proceso de suavizado de presión y derivación del volumen.
- El hecho de que el movimiento real del pistón no sea perfectamente ideal, con posibles rebotes o desaceleraciones asimétricas cerca del TDC.

Por esta razón, se optó por escalar el perfil original y construir uno idealizado, definido por tramos continuos que representaran de forma más realista las fases de aceleración, velocidad constante y frenado, sin exceder el desplazamiento máximo permitido por la máquina. Este nuevo perfil se basó en el avance de los pistones descrito por Yousefian et al. en “*Simplified Approach to the Prediction and Analysis of Temperature Inhomogeneity in Rapid Compression*

Machines”, ya que utilizaron una RCM igual en proporciones y dimensiones. Posteriormente, este perfil fue implementado en ANSYS Fluent como una *User Defined Function (UDF)* para controlar el movimiento del pistón en la simulación con malla dinámica. La Figura 16 compara el perfil de velocidad derivado de los datos experimentales con el perfil idealizado propuesto.

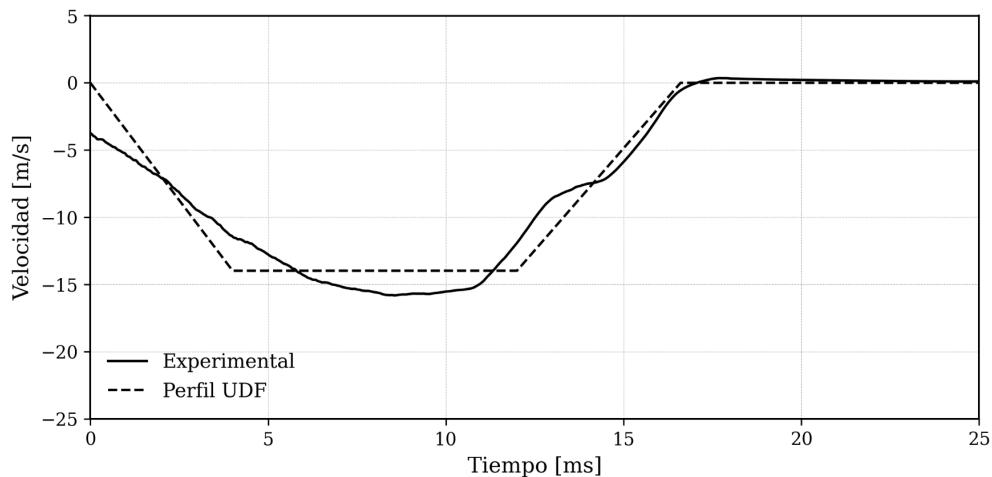


Figura 16: Comparación entre el perfil de velocidad experimental y el perfil idealizado.

7.5. Resultados

7.5.1. Curva de presión

La Figura 17 presenta la curva de presión obtenida experimentalmente (línea punteada), en comparación con las simulaciones numéricas para los modelos laminar (línea continua) y $k-\omega$ (línea discontinua). También se incluyen las bandas de error correspondientes, calculadas como la diferencia punto a punto entre la presión simulada y la experimental.

Se observa que ambas simulaciones reproducen adecuadamente la fase de compresión rápida, ajustándose con buena precisión a la tendencia del perfil experimental hasta alcanzar la presión máxima. No obstante, tras el punto de máxima compresión, se evidencia una sobreestimación en ambos modelos, siendo más notoria en el caso laminar.

El área sombreada indica el error de predicción respecto al perfil experimental. El modelo $k-\omega$ presenta una mejor concordancia durante la fase de expansión, con un error sistemáticamente menor que el modelo laminar, especialmente en el rango de 25 a 35 [bar]. Esta mejora puede atribuirse a la capacidad del modelo turbulento para capturar mejor las pérdidas por

cizalladura y disipación energética, que son relevantes en las regiones cercanas a la pared durante la relajación post-compresión.

En conjunto, el análisis sugiere que el modelo $k-\omega$ proporciona una mejor aproximación al comportamiento físico observado, particularmente en la predicción del decaimiento de presión después del pico máximo.

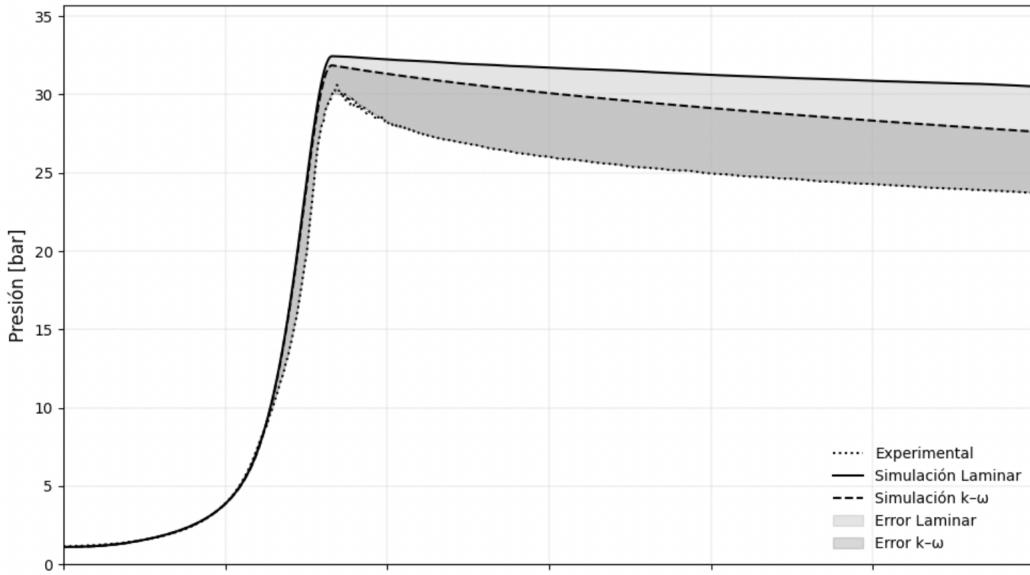


Figura 17: Comparación de la evolución temporal de la presión entre la curva experimental y las simulaciones laminar y $k-\omega$. Se incluyen áreas de error para cada caso.

7.5.2. Comparación de errores respecto a los datos experimentales

Para cuantificar la precisión de las simulaciones respecto a los datos experimentales, se calcularon el error absoluto medio (MAE, por sus siglas en inglés) y el error absoluto máximo (E_{\max}), tanto para el modelo laminar como para el modelo $k-\omega$, utilizando la siguiente definición:

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |P_{\text{sim}}(t_i) - P_{\text{exp}}(t_i)| \quad (30)$$

$$E_{\max} = \max_i |P_{\text{sim}}(t_i) - P_{\text{exp}}(t_i)| \quad (31)$$

Los resultados obtenidos se resumen a continuación:

Cuadro 4: Resumen de errores globales respecto al perfil experimental

| Modelo | MAE [bar] | Error Máx [bar] (tiempo [ms]) |
|------------|-----------|-------------------------------|
| Laminar | 0.7231 | 6.7981 (59.60) |
| $k-\omega$ | 0.6498 | 4.3503 (15.04) |

Cuadro 5: Errores absolutos máximos por intervalo temporal con tiempos correspondientes

| Modelo | Máx antes de 16.6 ms [bar] (ms) | Máx después de 16.6 ms [bar] (ms) |
|------------|---------------------------------|-----------------------------------|
| Laminar | 4.6710 (15.04) | 6.7981 (59.60) |
| $k-\omega$ | 4.3503 (15.04) | 4.1799 (35.60) |

Se observa que, si bien ambos modelos presentan errores moderados respecto al experimento, el modelo $k-\omega$ muestra una mejor capacidad predictiva, especialmente en el intervalo posterior a la compresión. El error absoluto máximo del modelo laminar es aproximadamente 1.56 veces mayor que el del modelo $k-\omega$:

7.5.3. Curva presión–volumen ($P-V$)

La Figura 18 presenta la curva presión–volumen ($P-V$) obtenida para ambos modelos de simulación en escala log–log, junto con la trayectoria idealizada basada en la relación politrópica $PV^\gamma = \text{cte}$. En el caso laminar se utilizó $\gamma = 1.4019$, mientras que para el modelo $k-\omega$ se obtuvo $\gamma = 1.4022$, determinado como el promedio temporal del coeficiente adiabático simulado.

En ambos casos, la trayectoria $P-V$ obtenida reproduce satisfactoriamente la tendencia idealizada, con pendientes muy cercanas a la esperada para un proceso cuasi-adiabático. Esta concordancia valida el supuesto fundamental del modelo politrópico, incluso en presencia de disipaciones térmicas y numéricas.

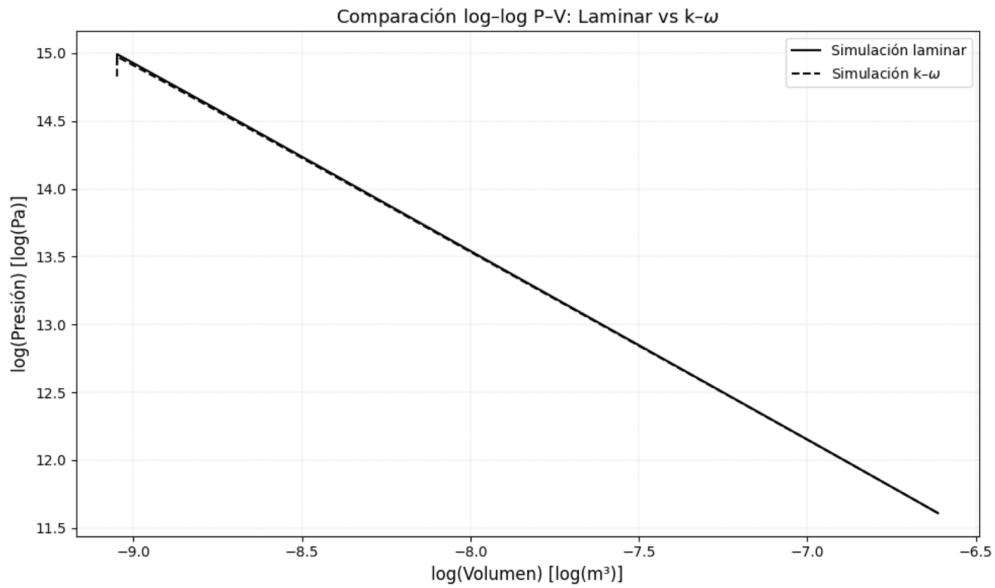


Figura 18: Comparación log–log entre curvas P–V simuladas (laminar y $k-\omega$ SST) y la trayectoria politrópica ideal.

7.5.4. Evolución del coeficiente adiabático

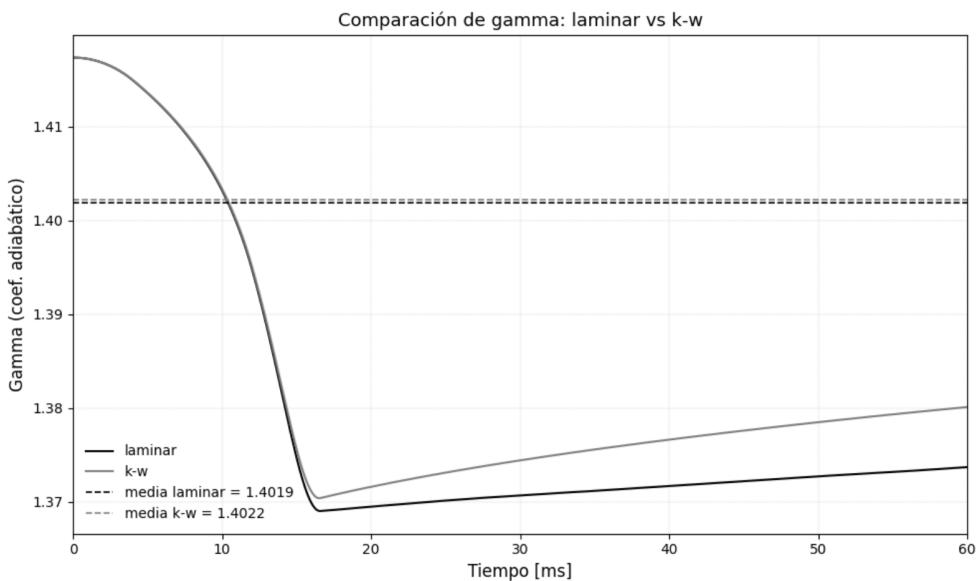


Figura 19: Evolución temporal del coeficiente adiabático $\gamma(t)$ para ambos modelos.

La Figura 19 muestra la evolución temporal del coeficiente adiabático $\gamma(t)$ para ambos modelos. En ambos casos se observa que el promedio tiende hacia valores cercanos a $\gamma = 1.4$,

con ligeras variaciones atribuidas a efectos locales de composición y transferencia térmica.

7.5.5. Curvas de temperatura

Las Figuras 20 y 21 presentan la evolución temporal de la temperatura promedio (T_{prom}) y máxima (T_{max}) en el dominio para los dos modelos.

Ambas simulaciones muestran un aumento sostenido de temperatura durante la compresión, alcanzando valores máximos de $T_{max} \approx 828$ [K] en el caso laminar y $T_{max} \approx 820$ [K] con el modelo $k-\omega$. La diferencia entre T_{prom} y T_{max} se acentúa al final de la compresión, revelando la no homogeneidad térmica en el dominio.

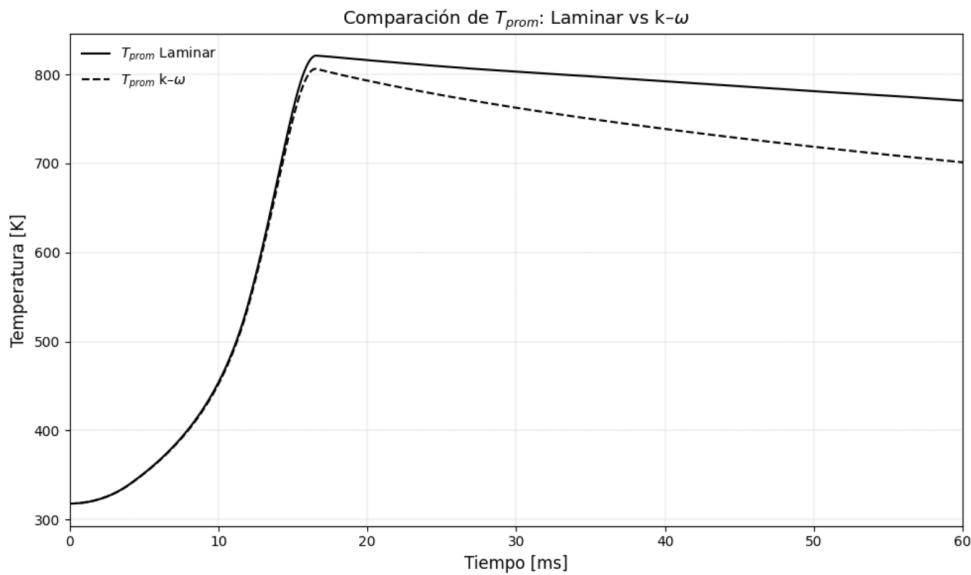


Figura 20: Evolución temporal de la temperatura promedio (T_{prom}) para ambos modelos.

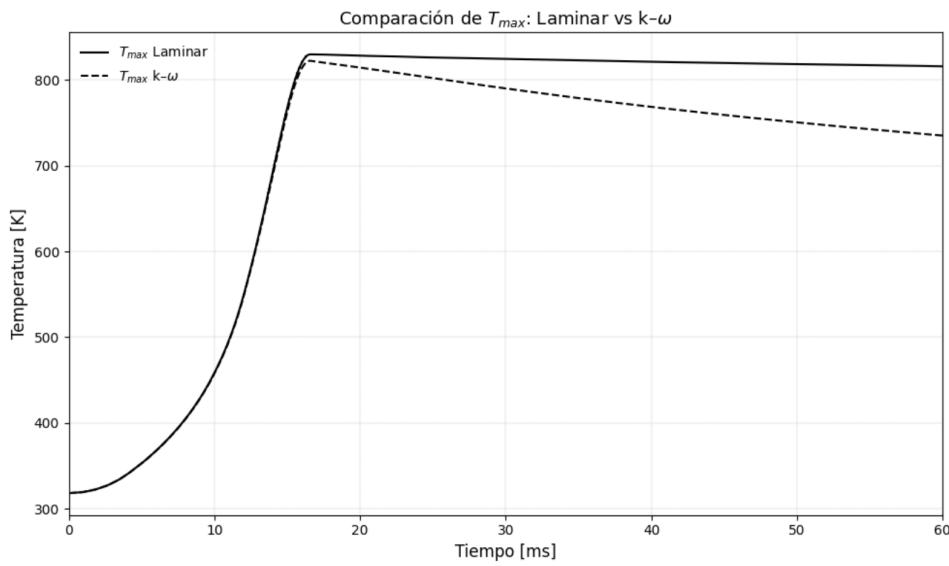


Figura 21: Evolución temporal de la temperatura máxima (T_{max}) para ambos modelos.

En la Figura 22 se muestra la evolución del campo de temperatura para el caso laminar en distintos instantes de tiempo. A primera vista, no se distingue con claridad la formación del vórtice característico que suele observarse en simulaciones sin ranura (*crevice*), como se ha documentado en estudios experimentales y numéricos previos. Esta diferencia puede estar relacionada principalmente con el grosor de malla utilizado, el cual no ofrece la resolución adecuada para capturar estructuras de recirculación de pequeña escala ni representar con precisión los gradientes térmicos más pronunciados cerca de las paredes.

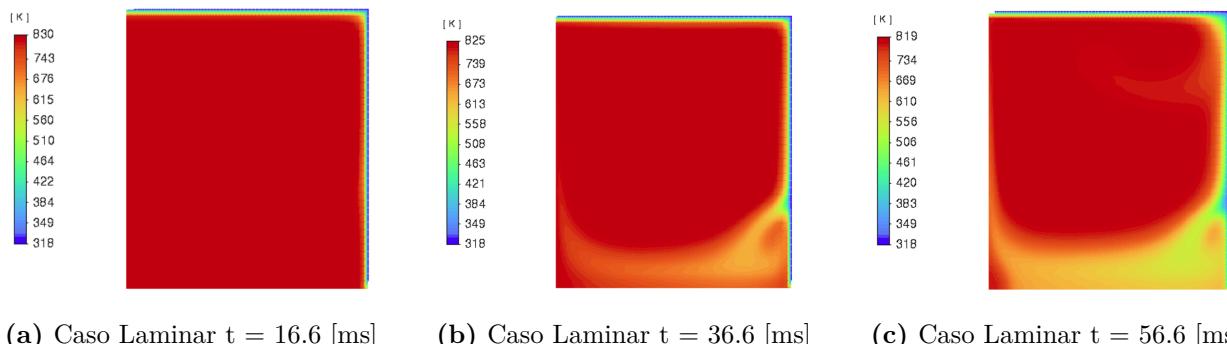


Figura 22: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes después del final de la compresión (caso laminar).

Si se refina aún más la malla, se puede obtener:

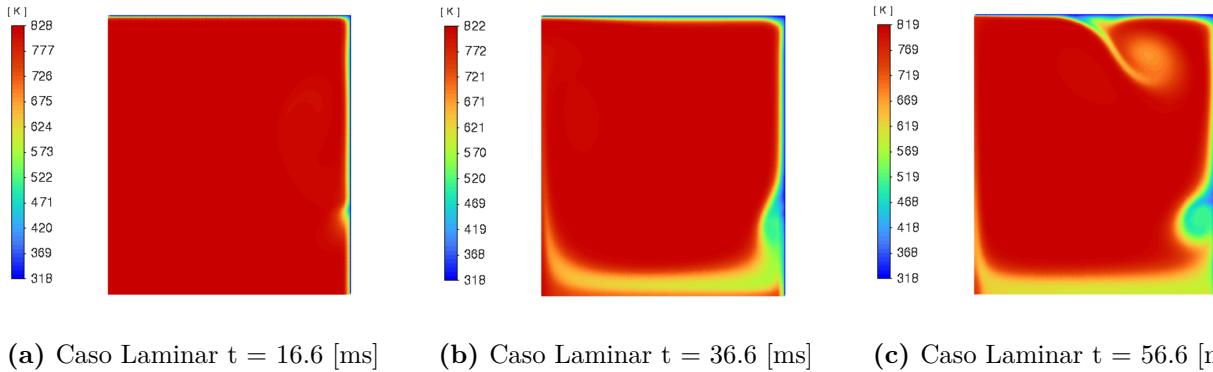


Figura 23: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes después del final de la compresión (caso laminar con malla refinada).

Es importante considerar que al refinar más la malla la temperatura máxima alcanzada dentro de la cámara tuvo una reducción de 2[K]. Esto demuestra que, con una mayor capacidad computacional se podrían obtener resultados más precisos. Para las comparaciones de las páginas posteriores, se considerará el caso 22, de modo de que estas sean coherentes entre si.

A pesar de esta limitación, el comportamiento global del campo térmico presenta similitudes cualitativas con lo reportado por Yousefian et al. [19], donde también se identifican regiones de alta temperatura concentradas en el centro de la cámara, con un gradiente térmico decreciente hacia las paredes. En consecuencia, se considera que la simulación laminar reproduce de forma adecuada la evolución térmica del sistema bajo las condiciones establecidas, y se acepta como suficientemente representativa para el análisis desarrollado en este trabajo.

Para el caso resuelto con el modelo $k - \omega$, en la figura 24 se observa que, a pesar del avance del tiempo, el perfil de temperatura se mantiene prácticamente sin cambios visibles, sin evidencias claras de mezcla turbulenta o desarrollo de estructuras dinámicas. Este comportamiento puede atribuirse a que la resolución espacial de la malla dinámica para captar los efectos turbulentos subyacentes de las ecuaciones del modelo $k - \omega$ es insuficiente. El modelo $k - \omega$ estándar está formulado para resolver fenómenos de turbulencia cerca de las paredes mediante una aproximación basada en la frecuencia específica de disipación turbulenta (ω).

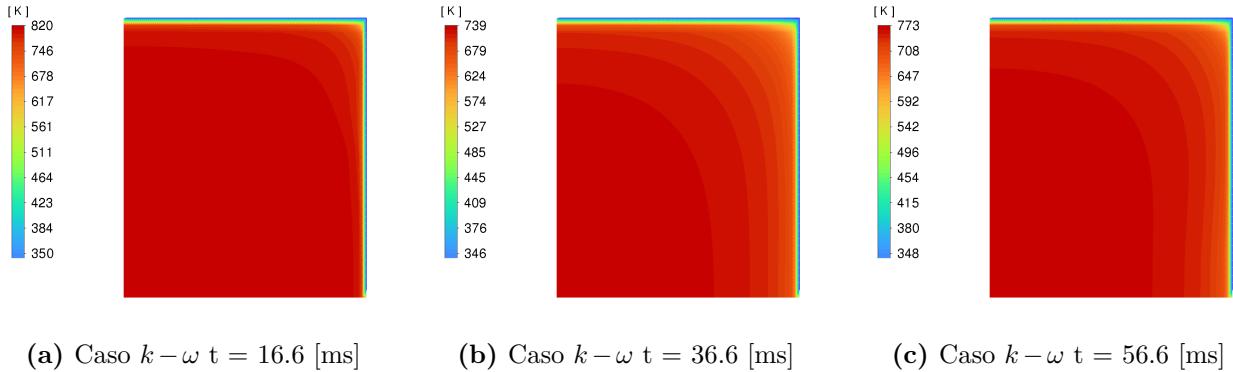


Figura 24: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes después del final de la compresión (Caso $k - \omega$).

Así, la ausencia de estructuras turbulentas en el modelo $k - \omega$ podría deberse no a una característica física del flujo, sino a una limitación del mallado empleado, que inhibe el desarrollo de la turbulencia predicha por el modelo. Esto pone en evidencia la importancia de ajustar el diseño del mallado al tipo de modelo numérico utilizado, particularmente cuando se trata de modelos sensibles al comportamiento cercano a las paredes como el $k - \omega$. Por esta razón, en el paso posterior, se decide, tal como en el paper de Mittal [11], continuar con el modelo laminar, pues es la opción más certera ante las limitaciones computacionales existentes.

7.5.6. Estimación teórica de la temperatura final

Se calculó la temperatura final teórica a partir de la ley politrópica:

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{V_1}{V_2} \right)^{\gamma-1}$$

Usando $T_1 = 318$ [K] y una razón volumétrica $V_1/V_2 = 188.5/16.5 \approx 11.4242$:

- Para el modelo laminar ($\gamma = 1.4019$):

$$T_2 = 318 \cdot (11.4242)^{0.4019} \approx 882.4 \text{ [K]}$$

Diferencia con el valor simulado $T_{max} = 830$ [K]: $\approx 6.31\%$

- Para el modelo $k-\omega$ ($\gamma = 1.4022$):

$$T_2 = 318 \cdot (11.4242)^{0.4022} \approx 885.6 \text{ [K]}$$

Diferencia con el valor simulado $T_{max} = 820$ [K]: $\approx 7.61\%$

Estas diferencias se atribuyen a la transferencia de calor hacia la única superficie con temperatura fija (318[K]), así como a la resolución limitada de la malla uniforme utilizada, especialmente en la región cercana a la capa límite.

8. Influencia de una impureza sólida en la transferencia de calor y autoignición

8.1. Análisis de transferencia de calor con inclusión sólida

Con el objetivo de evaluar la influencia de una partícula sólida embebida en el gas sobre el perfil térmico durante la compresión, se incorporó una partícula circular de radio $r = 0.25 \text{ [mm]}$ (diámetro $d = 0.5 \text{ [mm]}$) en el dominio 2D de simulación. La partícula fue colocada con centro en $x = 15 \text{ [mm]}$, $y = 10 \text{ [mm]}$. Se realizaron dos simulaciones, una con la partícula constituida de cobre y otra de aluminio, ambos materiales con diferente conductividad térmica k , lo que permite analizar su influencia sobre el campo de temperaturas en el gas circundante.

8.1.1. Condición de continuidad en la interfaz

El análisis se basa en la continuidad del flujo térmico en la interfaz entre dos medios, descrito por:

$$k_{\text{gas}} \frac{\partial T_{\text{gas}}}{\partial n} \Big|_{\text{int}} = k_{\text{sólido}} \frac{\partial T_{\text{sólido}}}{\partial n} \Big|_{\text{int}}$$

Esta relación puede reescribirse en función de la difusividad térmica $\alpha = k/\rho c_p$, quedando:

$$\alpha_{\text{gas}} \frac{\partial T_{\text{gas}}}{\partial n} = \alpha_{\text{sólido}} \frac{\partial T_{\text{sólido}}}{\partial n}$$

Cuando la razón entre difusividades térmicas es alta, el material con mayor α tiende a presentar gradientes internos de temperatura más suaves. Como resultado, el gradiente de temperatura en el gas circundante se ve obligado a incrementarse para mantener la continuidad del flujo térmico.

8.1.2. Importancia del parámetro α

La difusividad térmica α controla qué tan rápido se propaga el calor dentro de un material. Materiales con alta α , como el cobre, tienden a tener distribuciones internas de temperatura más uniformes, disipando calor más eficazmente hacia el entorno. En contraste, materiales con menor α , como el aluminio, almacenan calor localmente por más tiempo. Por tanto, se espera

que el cobre provoque una redistribución térmica más eficiente que el aluminio, afectando el perfil de temperatura del gas.

8.1.3. Justificación del análisis

Si bien el presente estudio incorpora una impureza sólida cuya consideración no ha sido documentada en investigaciones previas sobre máquinas de compresión rápida (RCM), al menos hasta donde alcanza el conocimiento de la autora, su inclusión permite explorar el efecto de una heterogeneidad térmica localizada en el campo de temperatura durante la compresión. Este planteamiento amplía los enfoques tradicionales, que han centrado su atención en inhomogeneidades originadas por la transferencia de calor hacia las paredes y por la formación de vórtices de esquina.

Basado en el paper de Yousefian et al. (2015) [19], se puede concluir que, dado que la velocidad de las reacciones químicas depende de forma exponencial de la temperatura, incluso pequeñas variaciones en la distribución térmica pueden generar diferencias significativas en el comportamiento del sistema.

En este contexto, la inclusión de una impureza sólida permite evaluar la capacidad del modelo computacional para resolver correctamente transiciones térmicas abruptas en la interfaz gas–sólido, lo cual resulta clave para validar la fidelidad física del esquema numérico y analizar el efecto que este tipo de heterogeneidad podría tener sobre la autoignición.

8.2. Configuración del dominio y estrategia de mallado

Para esta simulación se emplean tres cuerpos sólidos acoplados mediante una topología compartida, de modo que actúen como una unidad continua durante el proceso de compresión. Esta estrategia permite una correcta transferencia de energía entre dominios y facilita el control de la malla en zonas críticas. El dominio completo se discretiza con diferentes resoluciones de malla según la región, buscando un balance entre precisión numérica y eficiencia computacional. La decisión de utilizar tres cuerpos, en lugar de dos, responde a la necesidad de controlar con mayor detalle la malla alrededor de la partícula. Además, se posiciona dicha partícula en la sección final del dominio, lo que permite evitar interferencias con el proceso de *layering* durante la deformación de la malla.

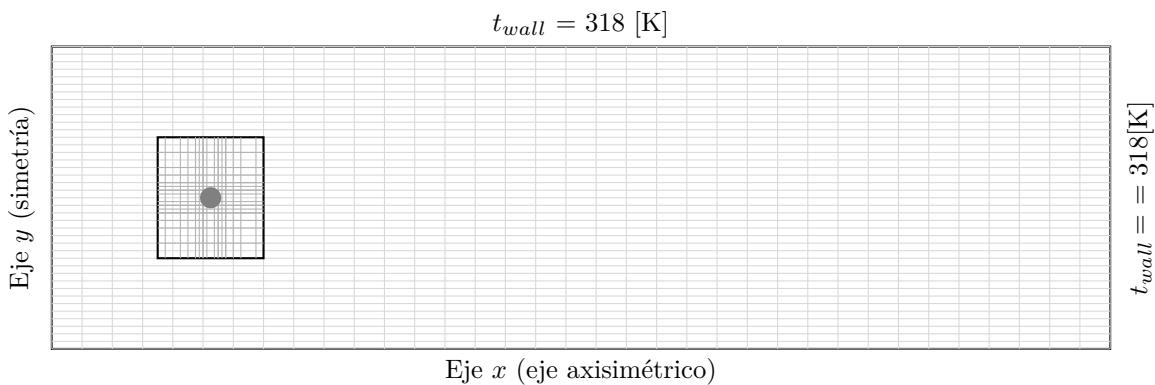


Figura 25: Dominio computacional con malla gruesa exterior y refinamiento irregular en la vecindad de la partícula.

El dominio exterior, que se comprime durante el proceso, fue mallado con celdas estructuradas de tamaño uniforme, utilizando un paso espacial de $dx = 0.5\text{[mm]}$ y $dy = 0.1\text{[mm]}$. En contraste, la región ubicada más allá del punto muerto superior (TDC) se discretizó con celdas cuadriláteras uniformes de $dx = dy = 0.1\text{[mm]}$. El subdominio interior, que contiene la partícula, presenta una malla irregular, con refinamiento progresivo hacia el centro. La partícula sólida, situada en el centro de este subdominio, fue discretizada mediante celdas cuadriláteras finas de 0.005[mm] , con el fin de capturar adecuadamente los gradientes térmicos inducidos por su alta difusividad térmica.

Adicionalmente, se introdujo una división geométrica en la región correspondiente a $x = 16.5\text{[mm]}$, con el objetivo de segmentar el dominio en bloques que faciliten la generación de una malla completamente cuadrilátera con calidad aceptable. Esta estrategia permite preservar la calidad del mallado en términos de *skewness*, *orthogonal quality* y otros indicadores, en la zona que experimenta mayor deformación durante la compresión, evitando que el subdominio afecte negativamente el comportamiento numérico en esa región crítica.

8.3. Resultados y análisis

Los materiales seleccionados para la partícula sólida fueron cobre y aluminio, debido a su alta conductividad térmica, con valores aproximados de $k = 401\text{[W/m · K]}$ para el cobre y $k = 237\text{[W/m · K]}$ para el aluminio. Estas propiedades los convierten en excelentes candidatos para estudiar el efecto de redistribución térmica dentro del dominio gaseoso, particularmente en condiciones transitorias de compresión.

Se consideraron tres configuraciones distintas para analizar la influencia térmica de la partícula en el proceso de compresión:

- **Caso 1:** La partícula sólida se encuentra inicialmente a la misma temperatura que el gas circundante, $T_0 = 318\text{[K]}$. Este caso se emplea como sistema de referencia para el análisis comparativo.
- **Caso 2:** La partícula presenta una temperatura inicial superior a la del gas, con $T_0 = 400\text{[K]}$. El objetivo de este caso es evaluar el efecto de un gradiente térmico inicial en la evolución del sistema.
- **Caso 3:** Se reemplaza la partícula única de 0.5 [mm] de diámetro por tres partículas de 0.25 [mm], distribuidas en el subdominio interior, a la misma temperatura que el gas circundante, $T_0 = 318\text{[K]}$. Esta configuración presenta una menor área total, lo que permite examinar cómo varía la transferencia de calor con diferentes relaciones de superficie sólida y distribución.

Los resultados obtenidos se presentan a continuación:

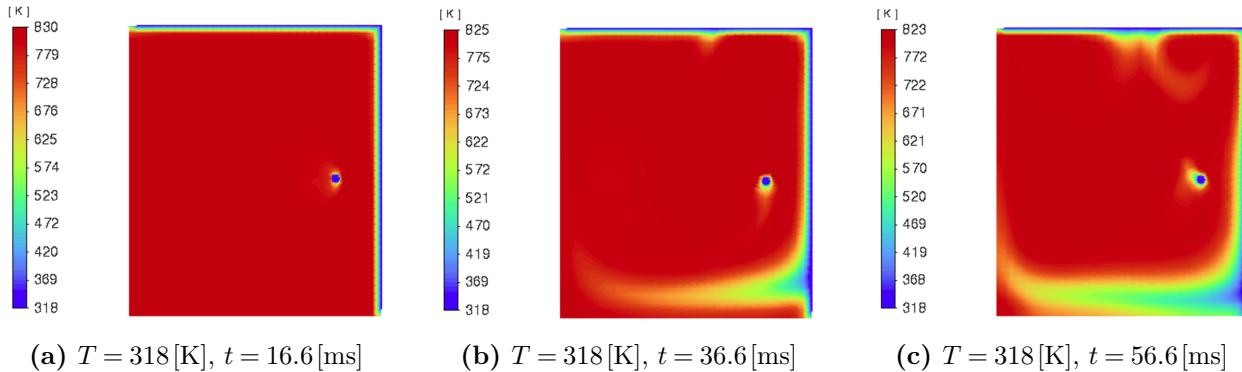


Figura 26: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes posteriores al final de la compresión, para una partícula de cobre a $T = 318\text{[K]}$.

Se realiza un símil con la partícula a 400 [K], y se obtienen los siguientes resultados:

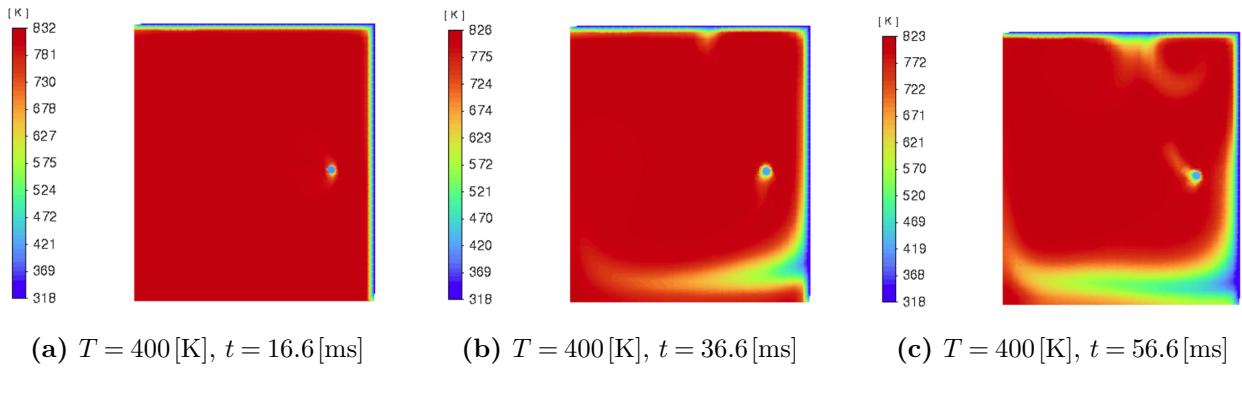
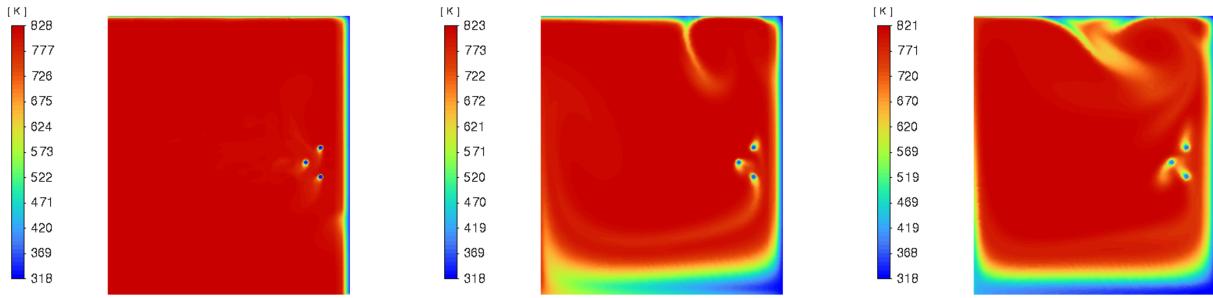


Figura 27: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes posteriores al final de la compresión, para una partícula de cobre a $T = 400\text{[K]}$.

Al comparar estos resultados con la simulación sin partícula, se observa que la temperatura máxima alcanzada en la cámara varía según la temperatura inicial de la partícula. Cuando esta comienza a la misma temperatura que el dominio (318[K]), la temperatura máxima no presenta diferencias significativas respecto al caso base. Sin embargo, se aprecia una leve reducción en la temperatura promedio, seguida de una evolución térmica posterior que se mantiene por encima del perfil sin partícula, lo que sugiere un efecto de homogenización térmica en la cámara. En contraste, cuando la partícula inicia a 400[K] , la temperatura máxima aumenta aproximadamente 2[K] , y la curva térmica permanece desplazada hacia arriba en todo momento. Este comportamiento se atribuye a que el cobre actúa como un foco térmico, almacenando y redistribuyendo calor al gas circundante durante la fase post-compresión.

A partir de esta observación, surge la hipótesis de que un mayor número de partículas pequeñas podría generar una diferencia en este fenómeno. Para explorar esta posibilidad, se colocaron tres partículas en la misma región que la partícula original, cada una con la mitad del área de la anterior. Los resultados obtenidos se ilustran a continuación:



(a) $T = 318 \text{ [K]}$, $t = 16.6 \text{ [ms]}$

(b) $T = 318 \text{ [K]}$, $t = 36.6 \text{ [ms]}$

(c) $T = 318 \text{ [K]}$, $t = 56.6 \text{ [ms]}$

Figura 28: Comparación de los campos de temperatura simulados con tres partículas de cobre más pequeñas, ubicadas en la misma región.

Con ello, se obtuvo la siguiente curva de temperatura:

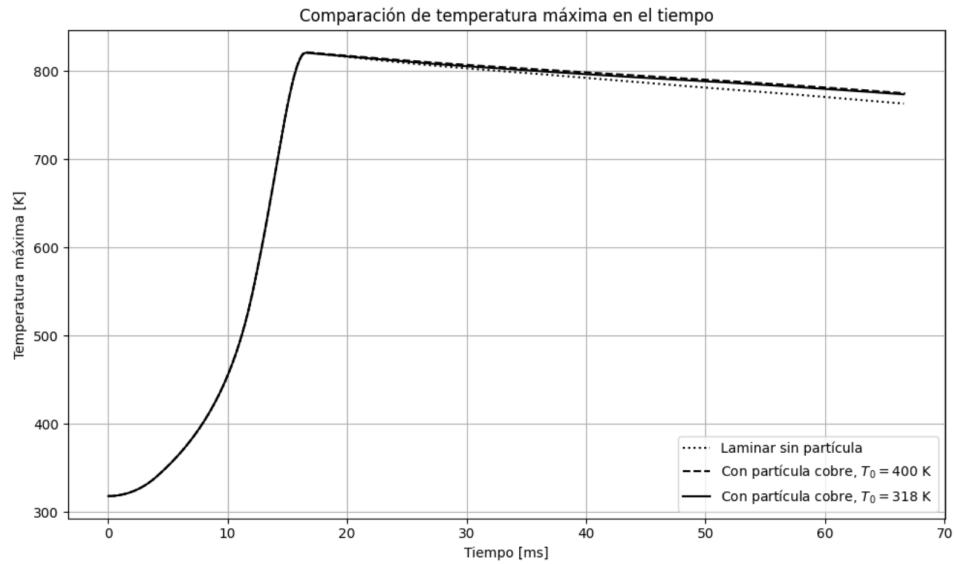


Figura 29: Evolución de la temperatura en la cámara principal para los casos con y sin partícula de cobre. Se incluye una comparación entre la partícula a $T_0 = 318 \text{ [K]}$ y $T_0 = 400 \text{ [K]}$.

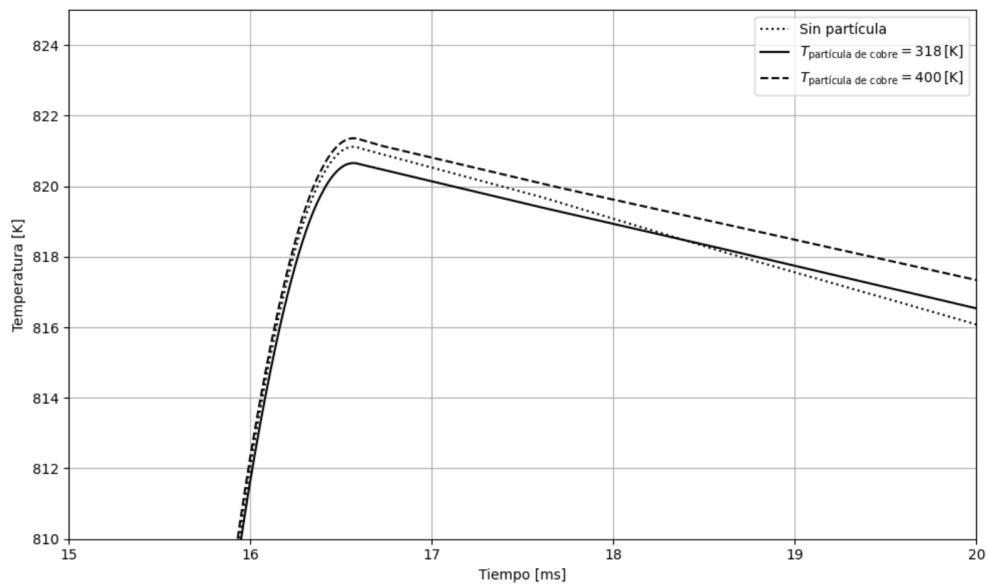


Figura 30: Zoom de la evolución de la temperatura promedio en la cámara principal para los casos con y sin partícula de cobre. Se incluye una comparación entre la partícula a $T_0 = 318\text{[K]}$ y $T_0 = 400\text{[K]}$.

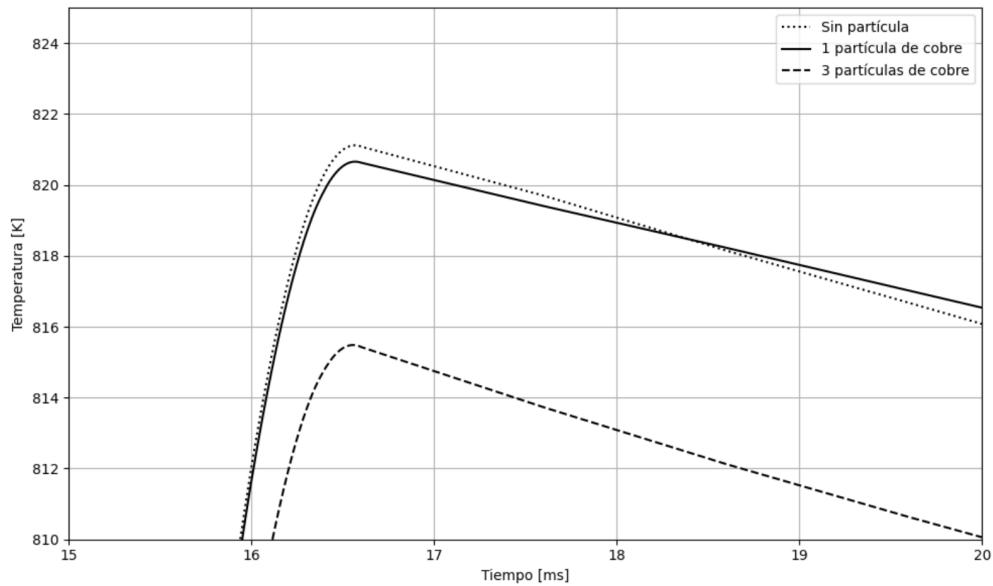


Figura 31: Zoom de la evolución de la temperatura promedio en la cámara principal para los casos sin partícula de cobre, con una, y con tres.

En la Figura 30 se observa que, cuando la partícula inicia a una temperatura de 400[K], la temperatura promedio se mantiene aproximadamente 1[K] por encima del perfil laminar sin

partícula, a diferencia de la partícula que parte a la misma temperatura que la cámara. A partir de esto, se puede inferir que la presencia de la partícula en sí contribuye a una mayor homogeneidad térmica en el interior de la cámara, mientras que su temperatura inicial incide tanto en la temperatura promedio como en el valor máximo alcanzado durante la compresión.

Por otra parte, en la Figura 31, se evidencia que contar con una única área continua resulta más efectivo para lograr una mayor homogenización de la temperatura en la cámara después de la compresión, en comparación con la presencia de pequeñas áreas distribuidas a lo largo del dominio.

Si se cambia el material de la partícula a aluminio, con $K = 237 [W/(m \cdot K)]$, se observa que los resultados se mantienen muy similares, como se muestra en la siguiente imagen:

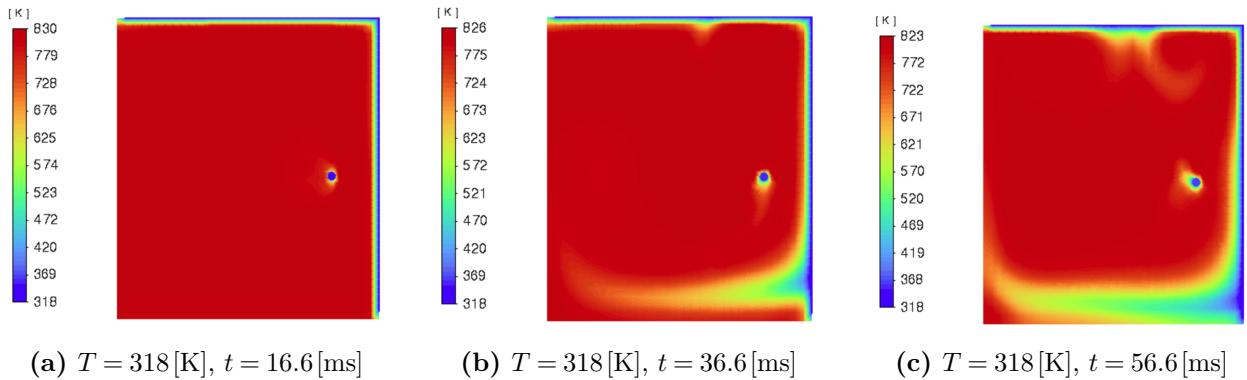


Figura 32: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes posteriores al final de la compresión, para una partícula de aluminio a $T = 318\text{[K]}$.

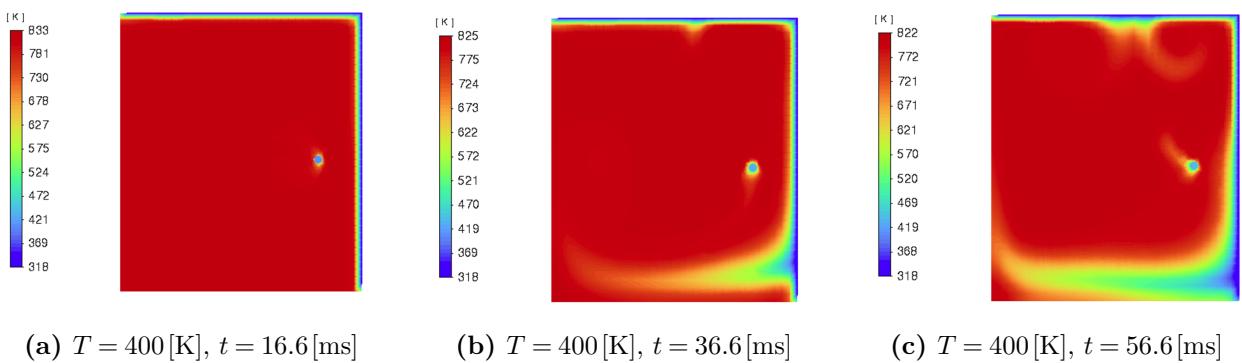
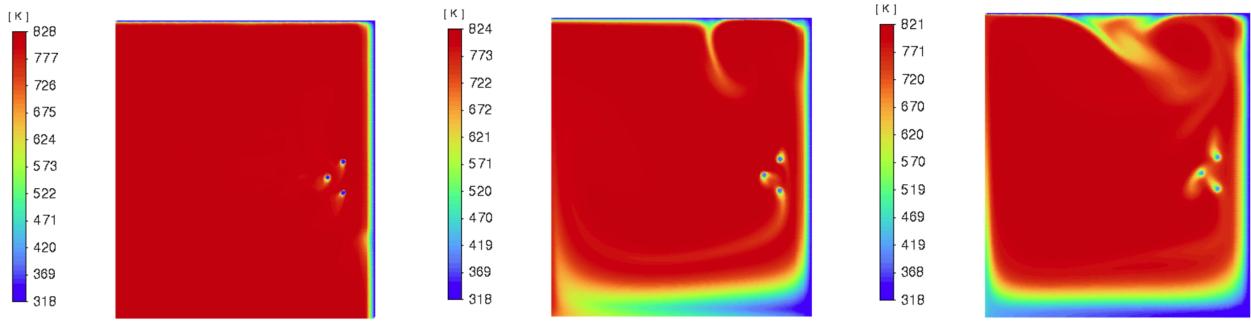


Figura 33: Comparación de los campos de temperatura simulados dentro de la cámara principal de reacción en distintos instantes posteriores al final de la compresión, para una partícula de cobre a $T = 400\text{[K]}$.



(a) $T = 318 \text{ [K]}$, $t = 16.6 \text{ [ms]}$ (b) $T = 318 \text{ [K]}$, $t = 36.6 \text{ [ms]}$ (c) $T = 318 \text{ [K]}$, $t = 56.6 \text{ [ms]}$

Figura 34: Comparación de los campos de temperatura simulados con tres partículas de aluminio más pequeñas, ubicadas en la misma región.

Al comparar ambos casos, se observa que el fenómeno térmico resultante al utilizar cobre o aluminio como material de la partícula conduce a valores prácticamente indistinguibles, tanto en términos de temperatura máxima como de evolución térmica promedio. Con ello, las gráficas asociadas resultan en:

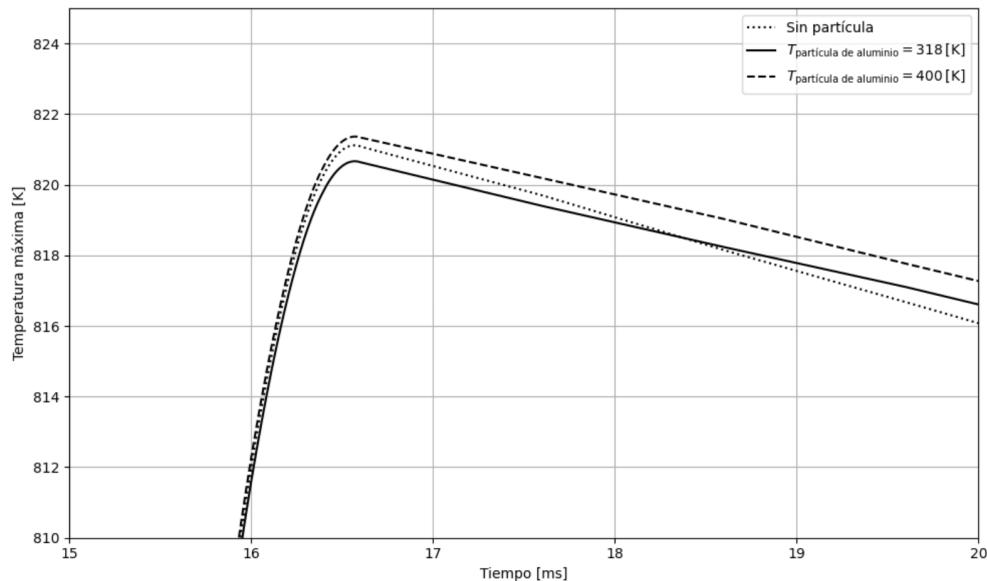


Figura 35: Zoom de la evolución de la temperatura promedio en la cámara principal para los casos con y sin partícula de aluminio. Se incluye una comparación entre la partícula a $T_0 = 318 \text{ [K]}$ y $T_0 = 400 \text{ [K]}$.

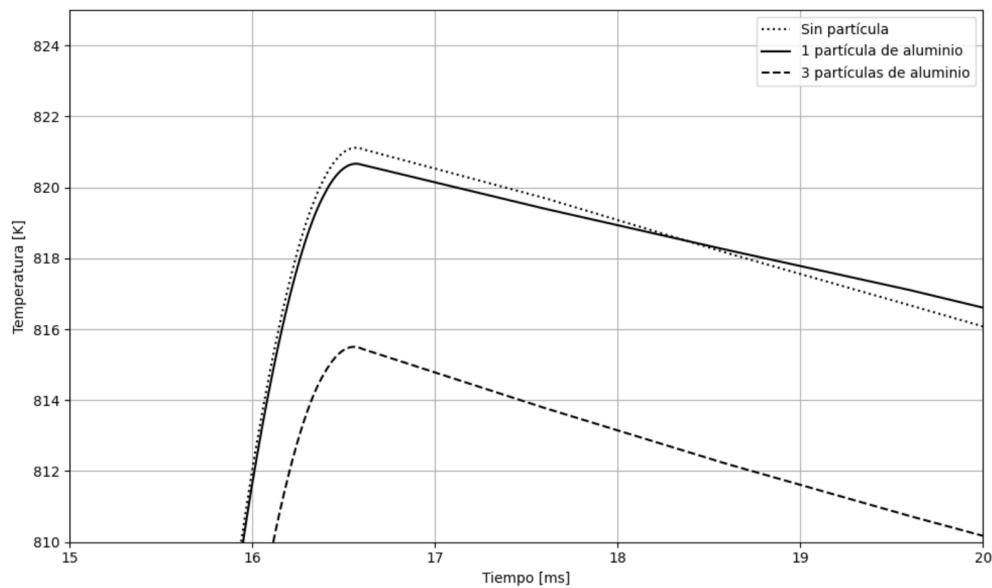


Figura 36: Zoom de la evolución de la temperatura promedio en la cámara principal para los casos sin partícula de aluminio, con una, y con tres.

Llevando estos resultados a una tabla se obtiene:

Cuadro 6: Comparación de temperaturas máximas según configuración del caso para el cobre.

| Configuración | T _{max} [K] | T _{max promedio} [K] |
|---|----------------------|-------------------------------|
| Laminar sin partícula | 830 | 821.1 |
| Laminar con 1 partícula de cobre (318 K) | 830 | 820.6 |
| Laminar con 1 partícula de cobre (400 K) | 832 | 821.6 |
| Laminar con 3 partículas de cobre (318 K) | 828 | 815.5 |

Para el caso del aluminio,

Cuadro 7: Comparación de temperaturas máximas según configuración del caso para el aluminio.

| Configuración | T _{max} [K] | T _{max promedio} [K] |
|--|----------------------|-------------------------------|
| Laminar sin partícula | 830 | 821.1 |
| Laminar con 1 partícula de aluminio (318 K) | 830 | 820.7 |
| Laminar con 1 partícula de aluminio (400 K) | 833 | 821.7 |
| Laminar con 3 partículas de aluminio (318 K) | 828 | 815.5 |

A pesar de que se busca identificar el punto más caliente dentro de la cámara, la distribución de temperatura resultó prácticamente homogénea en la región central. Si bien los valores

máximos tienden a concentrarse cerca del centro, las diferencias entre celdas son mínimas, por lo que no es posible señalar con certeza una celda como la de mayor temperatura sin incurrir en dudas asociadas al error numérico. En este contexto, cualquier variación observada podría deberse más a la discretización o a efectos de interpolación que a un fenómeno físico real.

9. Conclusiones y recomendaciones para la continuidad

9.1. Conclusiones

El presente estudio logró modelar y analizar computacionalmente el comportamiento térmico de mezclas gaseosas de hidrógeno bajo compresión rápida, evaluando además la influencia de impurezas sólidas en la transferencia de calor. Mediante la validación del modelo numérico contra datos experimentales de la literatura y el posterior análisis con datos propios, se pudo comprobar la capacidad del enfoque CFD para reproducir satisfactoriamente la evolución de la presión y temperatura en una máquina de compresión rápida (RCM).

Se concluye que:

- El modelo implementado en ANSYS Fluent, con un dominio axisimétrico en 2D y malla dinámica basada en el método *layering*, logró reproducir adecuadamente los fenómenos involucrados durante la compresión de la mezcla gaseosa, con errores moderados respecto a los datos experimentales.
- La inclusión de un modelo de turbulencia ($k-\omega$) mejoró la predicción en la fase post-compresión respecto al modelo laminar, aunque la resolución de malla utilizada no permitió capturar completamente los efectos turbulentos. Si bien estudios previos indican que no existe evidencia concluyente de que un modelo de turbulencia sea más apropiado para este tipo de estudios, resultaría interesante explorarlo en un caso reactivo, donde la presencia de la partícula, sumada a la acción de los remolinos, podría afectar tanto el tiempo como la localización de la autoignición.
- La temperatura máxima simulada mostró una buena concordancia con la estimación teórica basada en un proceso politrópico, validando el enfoque físico utilizado para modelar el sistema, en línea con lo que asumen trabajos académicos previos.
- La incorporación de una partícula evidenció de que la temperatura máxima de la cámara y la temperatura máxima promedio son dependientes de los parámetros asociados. De ello, se puede decir que:
 - La temperatura inicial de la partícula incide directamente en la temperatura máxima alcanzada.

- La presencia de la partícula provoca una homogenización de la temperatura de la cámara post - compresión. Este fenómeno parece tener una relación proporcional a la temperatura inicial de la partícula.
- El área de las partículas es el parámetro más influyente en el impacto de la temperatura máxima y la temperatura máxima promedio.
- La conductividad térmica parece no afectar significativamente a la transferencia de calor entre la partícula y el sistema.

Cabe destacar que en esta simulación se utilizaron pocas partículas, con diámetros entre 0.25 [mm] y 0.5 [mm], lo cual limita la influencia térmica general observada. Si se extrapolara el análisis a una escala más realista, podría esperarse una mayor capacidad global de almacenamiento y redistribución de calor, así como una mayor superficie efectiva de interacción térmica. Este efecto acumulativo podría manifestarse no solo en un aumento más evidente de la temperatura máxima alcanzada, sino también en una mayor inercia térmica del sistema, capaz de modificar significativamente los gradientes térmicos locales y afectar la estabilidad del proceso de compresión e ignición.

9.2. Recomendaciones para trabajos futuros

A partir de lo desarrollado en este trabajo, y considerando sus limitaciones, se propone:

- **Simulaciones reactivas:** Una extensión natural de este estudio sería incorporar reacciones químicas al modelo, utilizando mecanismos cinéticos detallados en formato CHEMKIN como los publicados por la Universidad de San Diego, California. Esto permitiría analizar directamente cómo la presencia de impurezas afecta el tiempo de autoignición, y verificar la teoría con la que se cierra este trabajo: que su inclusión podría anticipar el encendido dependiendo de las condiciones iniciales de estas. Además, posibilitaría determinar con mayor precisión el lugar dentro de la cámara donde comenzaría la autoignición, lo que resulta clave para entender su impacto en mezclas no homogéneas.
- **Refinamiento de malla:** Sería útil trabajar con mallas más finas, especialmente cerca de las partículas y paredes, para capturar mejor los gradientes térmicos y posibles efectos locales de cizalladura. Esto es especialmente importante si se quieren estudiar estructuras pequeñas como vórtices o capas límite térmicas delgadas.

- **Estudio paramétrico de impurezas:** Un aspecto interesante sería explorar nuevamente el efecto de más de una partícula, cambiando tamaños, materiales, temperatura y posiciones con una malla más fina, como se propuso en el ítem anterior. Esto permitiría entender mejor si el efecto observado se amplifica o se distribuye cuando hay múltiples impurezas, y validar, nuevamente, que esto impacta en la homogeneidad térmica de la cámara post-compresión.
- **Otros modelos de turbulencia:** Aunque este estudio se enfocó principalmente en el modelo laminar y el estándar $k-\omega$, con más recursos computacionales se podría evaluar la respuesta con modelos más complejos como el $k-\omega SST$ o incluso LES , para ver si capturan mejor las interacciones en zonas cercanas a la partícula.
- **Modelar el crevice:** Incluir el canal lateral (crevice) podría mejorar bastante la fielididad del modelo, especialmente para observar cómo se comportan las zonas frías o los gradientes cerca del borde. Aunque tiene un costo computacional alto, permitiría estudiar mejor la aparición de vórtices y su impacto térmico.

Referencias

- [1] Amador, G. (s.f.). Improvement Autoignition Predictions of Premixed Hydrogen. Universidad Técnica Federico Santa María.
- [2] ANSYS Inc. (2023). *ANSYS Fluent Theory Guide*. Disponible en: <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent>
- [3] ANSYS Inc. (2023). *ANSYS Fluent User's Guide*. Chapter 26.2.3. Disponible en: <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/ug/node717.htm>
- [4] Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2006). *Transport Phenomena* (2nd ed.). John Wiley & Sons.
- [5] Çengel, Y. A., & Boles, M. A. (2006). *Thermodynamics: An Engineering Approach* (5ta ed.). McGraw-Hill.
- [6] Çengel, Y. A. (2007). *Transferencia de calor y masa* (3ra ed.). McGraw-Hill.
- [7] Fox, R. W., McDonald, A. T., & Pritchard, P. J. (2020). *Introduction to Fluid Mechanics* (8th ed.). Wiley.
- [8] Incropera, F. P., DeWitt, D. P., Bergman, T. L., & Lavine, A. S. (2007). *Fundamentals of Heat and Mass Transfer* (6th ed.). John Wiley & Sons. Disponible en: <https://hyominsite.wordpress.com/wp-content/uploads/2015/03/fundamentals-of-heat-and-mass-transfer-6th-edition.pdf>
- [9] Zikanov, O. (2010). *Essential Computational Fluid Dynamics*. Wiley.
- [10] Menter, F. R. (1992). Improved two-equation k-omega turbulence models for aerodynamic flows. *NASA Technical Reports Server*. Disponible en: <https://ntrs.nasa.gov/citations/19930013620>
- [11] Mittal, G., Raju, M. P., & Sung, C.-J. (2008). Computational fluid dynamics modeling of hydrogen ignition in a rapid compression machine. *Combustion and Flame*, **155**(3), 417–428.
- [12] McBride, B. J., & Gordon, S. (1996). *NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species*. NASA Reference Publication 1311.

- [13] McBride, B. J., Gordon, S., & Reno, M. A. (2002). *Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species*. NASA Report TM-2002-211556. Disponible en: <https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20020085330/downloads/20020085330.pdf>
- [14] Naciones Unidas. (s.f.-a). ¿Qué es el cambio climático? Disponible en: <https://www.un.org/es/climatechange/what-is-climate-change>
- [15] Naciones Unidas. (s.f.-b). El Acuerdo de París. Disponible en: <https://www.un.org/es/climatechange/paris-agreement>
- [16] Peng, D. Y., & Robinson, D. B. (1976). A New Two-Constant Equation of State. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, **15**(1), 59–64.
- [17] Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press. Disponible en: <https://www.cambridge.org/core/books/turbulent-flows/47D3A6E2DC3CFA1F13E10DA3288C0F76>
- [18] Turns, S. R. (2000). *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill.
- [19] Yousefian, S., Gauthier, F., Morán-Guerrero, A., Richardson, R. R., Curran, H. J., Quinlan, N. J., & Monaghan, R. F. D. (2015). Simplified approach to the prediction and analysis of temperature inhomogeneity in rapid compression machines. *Energy & Fuels*, **29**(11), 8216–8225.
- [20] Zikanov, O. (2010). *Essential Computational Fluid Dynamics*. Wiley.

10. Anexos

10.1. Polinomios de capacidad calorífica a presión constante (C_p) para las especies puras

Según el formato de los polinomios de la NASA (NASA 7-coefficient), la capacidad calorífica molar a presión constante de una especie puede expresarse como:

$$\frac{C_p}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (32)$$

donde T es la temperatura en Kelvin ([K]), y R es la constante universal de los gases. Esta expresión es **adimensional**, ya que C_p y R están en las mismas unidades de energía por mol y por grado Kelvin ([J/(mol · K)]). Para obtener el valor de C_p en unidades reales, basta con multiplicar por $R \approx 8.314$ [J/mol · K].

A continuación, se presentan los polinomios $\frac{C_p}{R}$ para cada componente de la mezcla en el rango de $200\text{[K]} \leq T \leq 1000\text{[K]}$, extraídos desde la biblioteca de Ansys Fluent y corroborados por el documento NASA/TP-2002-211556.

Hidrógeno (H₂):

$$\frac{C_p}{R} = 33.066178 - 11.363417T + 11.432816T^2 - 2.772874T^3 + 0.158558T^4 \quad (33)$$

Nitrógeno (N₂):

$$\frac{C_p}{R} = 28.98641 - 1.853978T + 9.647459T^2 - 3.835542T^3 + 0.000000T^4 \quad (34)$$

Argón (Ar):

$$\frac{C_p}{R} = 2.500000 \quad (35)$$

En el caso del argón, el valor es constante debido a su naturaleza monoatómica y su falta de modos vibracionales o rotacionales que contribuyan al calor específico.

Ejemplo: Para obtener el valor real de C_p del argón a cualquier temperatura en este rango:

$$C_p(\text{Ar}) = 2.5 \cdot R = 2.5 \cdot 8.314 = 20.785 \text{ [J/mol} \cdot \text{K]}$$

Por otro lado, en las simulaciones realizadas en ANSYS Fluent, se emplearon polinomios no adimensionales del tipo:

$$C_p(T) = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (36)$$

donde C_p se expresa directamente en unidades de $[\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})]$ y T en Kelvin. Los coeficientes usados para cada especie, en el rango de $300\text{K} \leq T \leq 1000\text{K}$, fueron los siguientes:

- **Hidrógeno (H_2):**

$$C_p(T) = 13602.45 + 3.402317T - 0.003358423T^2 - 3.907953 \times 10^{-7}T^3 + 1.705345 \times 10^{-9}T^4$$

- **Nitrógeno (N_2):**

$$C_p(T) = 979.043 + 0.4179639T - 0.001176279T^2 + 1.674394 \times 10^{-6}T^3 - 7.252697 \times 10^{-10}T^4$$

- **Oxígeno (O_2):**

$$C_p(T) = 834.8265 + 0.292958T - 0.0001495637T^2 + 3.413885 \times 10^{-7}T^3 - 2.278359 \times 10^{-10}T^4$$

- **Propano (C_3H_8):**

$$C_p(T) = 169.1106 + 5.032259T + 0.001024072T^2 - 4.008482 \times 10^{-6}T^3 + 1.74279 \times 10^{-9}T^4$$

- **Argón (Ar):**

$$C_p(T) = 520.331$$

(constante en este tramo)

10.2. UDF utilizados

A continuación se presentan los códigos *User-Defined Functions* (UDF) empleados para definir el perfil de movimiento del pistón en las simulaciones dinámicas de malla.

Perfil idealizado basado en Mittal et al.

Este perfil representa un movimiento segmentado compuesto por una aceleración inicial, una fase de velocidad constante y una desaceleración final.

```
#include "udf.h"

DEFINE(CG_MOTION(piston_motion, dt, cg_vel, cg_omega, time, dtime)
{
    real t_ms = time * 1000.0; // convertir a milisegundos
    real v;

    // Definir el perfil de velocidad por tramos
    if (t_ms <= 6.0)
        v = (6.0 / 6.0) * t_ms; // Aceleración de 0 a 6 m/s
    else if (t_ms <= 14.0)
        v = 6.0 + (3.0 / 8.0) * (t_ms - 6.0); // Aceleración de 6 a 9 m/s
    else if (t_ms <= 30.0)
        v = 9.0; // Constante
    else if (t_ms <= 33.0)
        v = 9.0 - (9.0 / 3.0) * (t_ms - 30.0); // Desaceleración a 0
    else
        v = 0.0;

    // Asignar velocidad (solo en dirección X)
    cg_vel[0] = -v; // negativa si el pistón se mueve hacia la izquierda
    cg_vel[1] = 0.0;
    cg_vel[2] = 0.0;

    // Sin rotación
```

```

    cg_omega[0] = 0.0;
    cg_omega[1] = 0.0;
    cg_omega[2] = 0.0;
}

```

Perfil experimental ajustado al desplazamiento real del pistón

Este perfil simula el movimiento del pistón desde una posición inicial hasta el TDC (Top Dead Center) en 16.6 ms, escalado a partir de datos experimentales.

```

#include "udf.h"

DEFINE_CG_MOTION(rcm_velocity_scaled, dt, vel, omega, time, dtime)
{
    real t_ms = time * 1000.0;

    omega[0] = 0.0;
    omega[1] = 0.0;
    omega[2] = 0.0;

    vel[1] = 0.0;
    vel[2] = 0.0;

    // Factor de escala para alcanzar 172 mm en 16.6 ms
    real factor = 172.0 / 147.6;

    if (t_ms <= 4.0)
        vel[0] = -factor * (12.0 / 4.0) * t_ms;
    else if (t_ms <= 12.0)
        vel[0] = -factor * 12.0;
    else if (t_ms <= 16.6)
        vel[0] = -factor * (12.0 - (12.0 / 4.6) * (t_ms - 12.0));
    else
        vel[0] = 0.0; // Fin del movimiento
}

```