



Evaluación de la presión umbral de autoignición en un escenario de almacenamiento de hidrógeno comprimido mediante CFD.

Presentado por:

Autor: Javier Andrés Ossa Correa

Directora: Adriana Katherine Niño Vargas Ph.D.

Co-director: Guillermo Andrés Jaramillo Pizarro Ph.D.

Tesis para optar por el título de
Ingeniero Químico



**IMPETUS
INDOMITUS**

Research Team in energy conversion
& propulsion revolution

IMPETUS INDOMITUS

Research Team in energy conversion and propulsion revolution

Escuela de Ingeniería Química

Universidad del Valle

Julio 2025

Agradecimientos

A la profesora Adriana Katherine Niño Vargas y al profesor Guillermo Andrés Jaramillo Pizarro por su constante acompañamiento académico; su experiencia, comprensión y paciencia fueron esenciales para la culminación de este proceso. A mi mejor amigo Juan Felipe Sarria, por su apoyo incondicional desde el inicio de la carrera. Finalmente, a mi familia, por los valores que me inculcaron, por las numerosas maneras en las que me han ayudado, y por entender cuando no he estado presente por priorizar mi vida académica, a todos ustedes, mi más sincera gratitud.

Resumen

En este documento se simuló un escenario de almacenamiento de hidrógeno comprimido, para comparar cómo las variaciones geométricas del sistema alteraban la presión umbral de autoignición del sistema. Se realizó una primera aproximación con la suposición de régimen laminar y posteriormente con régimen turbulento. Se encontró que la suposición de flujo laminar sí representa el efecto de la variación de la longitud de la tubería en la presión umbral, con una diferencia mínima y máxima de 1 y 50 % respectivamente; no tener en cuenta la disipación turbulenta resulta en un sistema en el que la presión de autoignición es independiente del diámetro, esto no es conveniente para estudiar el comportamiento de la autoignición distintas condiciones geométricas. Posteriormente, con base en los resultados obtenidos y observaciones del fenómeno de autoignición, se sugirieron distintas maneras de abordar casos de operación de almacenamiento de hidrógeno comprimido; con la finalidad de reducir el riesgo de autoignición intentando no reducir la presión de almacenamiento.

Palabras clave: *OpenFOAM, autoignición, Hidrógeno comprimido, CFD*

Índice general

Agradecimientos	2
Resumen	3
Índice de Figuras	5
Índice de Tablas	6
1. Introducción	8
1.1. Planteamiento del Problema	9
1.2. Estado del Arte	9
1.3. Justificación	12
1.4. Objetivos	13
1.4.1. Objetivo General	13
1.4.2. Objetivos Específicos	13
2. Marco Teórico	14
2.1. Gas Ideal	14
2.2. Combustión Espontánea	14
2.3. Método de volúmenes finitos (FVM)	16
2.3.1. Ecuaciones de gobierno	16
2.4. Números adimensionales	17
2.4.1. Número de Prandtl:	17
2.4.2. Número de Schmidt:	17
2.4.3. Número de Reynolds:	18
2.4.4. Número de Péclet:	18
2.4.5. Número de Courant:	18
2.5. Esquemas de discretización	18
2.6. Seulex	21
2.7. Algoritmo PIMPLE	21
3. Metodología	22
3.1. Selección del caso de estudio	23
3.2. Descripción del sistema experimental	24
3.3. Pre-procesamiento	25
3.3.1. Suposiciones del sistema	26
3.3.2. Elaboración de la geometría	29
3.3.3. Generación de la malla	32

3.3.4.	Condiciones iniciales y de frontera	34
3.3.5.	Selección del solucionador	35
3.3.6.	Selección de los esquemas de discretización	36
3.3.7.	Métodos numéricos	36
3.3.8.	Propiedades termodinámicas y de transporte	36
3.3.9.	Análisis de Independencia de Malla	39
4.	Resultados y análisis de resultados	43
4.1.	Tiempo de simulación	43
4.2.	Resultados numéricos	44
4.2.1.	Ocurrencia de la autoignición	45
4.2.2.	Comparación de los resultados numéricos	46
4.3.	Verificación de la simulación	46
4.3.1.	Presión umbral para distintas variaciones geométricas	47
4.3.2.	Velocidad promedio de la onda de choque	50
4.4.	Estrategias de almacenamiento	51
5.	Conclusiones	52
6.	Recomendaciones y futuros trabajos	53
6.1.	Recomendaciones	53
6.2.	Trabajos futuros	53
	Referencias	53
A.	Matriz de decisión del caso de estudio	58

Índice de figuras

2.1. Mecanismo de autoignición por difusión. Fuente: Autor	15
3.2. Diagrama de flujo de la metodología	22
3.3. Montaje experimental. Fuente: Autor	25
3.4. Diferencia absoluta porcentual volúmenes específicos gas ideal respecto a datos en NIST. Fuente: Autor	27
3.5. Vértices y orden de numeración de las caras. Fuente: Autor	29
3.6. Cálculo de las variables del eje z. Fuente: Autor	30
3.7. Definición de las caras del sistema. Fuente: Autor	31
3.8. División de la geometría a simular en 3 bloques de 6 caras. Fuente: Autor	31
3.9. Mallas generadas con la herramienta <i>blockMesh</i> , para dos casos distintos. Fuente: Autor	33
3.10. Análisis de independencia de malla en el punto (0.4985,0.0025,0) laminar. Fuente: Autor	39
3.11. Análisis de independencia de malla en el punto (0.4985,0.0025,0) turbulento. Fuente: Autor	40
3.12. Análisis de paso temporal máxima velocidad a distintas distancias del disco de ruptura caso laminar. Fuente: Autor	40
3.13. Análisis de paso temporal máxima velocidad a distintas distancias del disco de ruptura caso turbulento. Fuente: Autor	41
4.14. Distribución de temperatura a 0.3 ms de la ruptura para el caso laminar. Fuente: Autor	45
4.15. Fracción másica de H_2O a 0.3 ms de la ruptura. Fuente: Autor	47
4.16. Comparación presión umbral simulaciones a distintas geometrías. Fuente: Autor	48
4.17. Verificación 10mm. Fuente: Autor	48
4.18. Verificación 15mm. Fuente: Autor	49
4.19. Velocidad promedio de la onda de choque 10mm. Fuente: Autor	50
4.20. Velocidad promedio de la onda de choque 15mm. Fuente: Autor	50

Índice de tablas

3.1. Etapas de la metodología para la realización de trabajo de grado	23
3.2. Espaciado de los sensores a distintas longitudes de tubería	25
3.3. Mecanismo de reacción de combustión del hidrógeno propuesto por Conaire, et al. con unidades $cm^3, mol, s, kcal, K$. Tomado de: [46]	28
3.4. Coordenadas de cada uno de los vértices de la geometría, en el plano (zy) evaluado en $x = Ltot$	29
3.5. Condiciones de frontera para las distintas variables	34
3.6. Condiciones de frontera para las distintas variables de turbulencia	34
3.7. Valores iniciales estimados de las variables de turbulencia	34
3.8. Entalpía y entropía de formación para distintas especies [48].	37
3.9. Coeficientes polinomiales para la estimación de la capacidad calorífica a presión constante, de distintas sustancias [48].	37
3.10. Coeficientes polinomiales para calcular la viscosidad de distintas especies [48].	38
3.11. Coeficientes polinomiales para calcular la conductividad térmica de distintas espe- cies [48].	38
3.12. Cantidades de elementos y características de los elementos para distintos refina- mientos de la malla caso laminar.	39
3.13. Cantidades de elementos y características de los elementos para distintos refina- mientos de la malla caso turbulento para 300mm 15 mm.	39
3.14. Número de elementos de las mallas para distintas condiciones geométricas de longi- tud y diámetro para el caso laminar	41
3.15. Número de elementos de las mallas para distintas condiciones geométricas de longi- tud y diámetro para el caso turbulento	42
4.16. Horas de simulación para los casos laminares de 10mm	43
4.17. Horas de simulación para los casos laminares de 15mm	43
4.18. Horas de simulación para los casos turbulentos de 10mm	44
4.19. Horas de simulación para los casos turbulentos de 15mm	44
4.20. Diferencia porcentual para la verificación de las simulaciones en el caso laminar de 15mm	49
4.21. Diferencia porcentual para la verificación de las simulaciones en el caso laminar de 15mm	49

1. Introducción

En la actualidad, el calentamiento global se ha convertido en uno de los problemas más serios que enfrenta la humanidad [1]; este surge principalmente por el uso de combustibles fósiles como fuente primaria de energía, cuya combustión produce grandes cantidades de gases de efecto invernadero [2]. Ante esta situación han surgido conferencias y tratados, como la Conferencia de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (COP) y el Acuerdo de París, respectivamente. Una de las metas principales del Acuerdo de París, es la rápida descarbonización del sistema de energía para limitar el aumento de la temperatura global a 2°C respecto a los niveles de temperatura preindustriales [3]; con respecto a esta situación, el hidrógeno es una sustancia prometedora para reducir las emisiones y cumplir con las metas establecidas [4]; ya que es el combustible con mayor densidad energética en términos másicos [2], su combustión no genera emisiones de CO_2 y puede usarse en motores de combustión interna, celdas de combustible y principalmente como medio de almacenamiento o transporte de energía, es decir, como vector energético [4].

Respecto al Acuerdo de París, Colombia se compromete a una reducción de emisiones del 51 % para el 2030, y cuenta con fortalezas en materia de recursos y geografía para la producción de hidrógeno verde. Para el año 2050 se estima una demanda interna de 1850 kilotoneladas de hidrógeno y potenciales exportaciones hacia Asia (190 millones de toneladas), la Unión Europea (60 millones de toneladas) y Estados Unidos (60 millones de toneladas) [5].

Para el almacenamiento del hidrógeno existen distintos métodos físicos como el almacenamiento crió-comprimido, comprimido y el hidrógeno líquido; y métodos basados en materiales, como portadores orgánicos líquidos, fisisorción y quimisorción. Los métodos basados en materiales requieren de largos tiempos de extracción para poder aprovechar el hidrógeno, y los métodos físicos son disponibles de manera instantánea. Entre los métodos físicos, el almacenamiento de hidrógeno comprimido es el que menor pérdida energética presenta [4][6]. Sin embargo, el almacenamiento de hidrógeno a altas presiones está relacionado a problemas de seguridad como: fragilización, permeación, fugas y combustión espontánea [7].

Este trabajo contiene el estudio numérico de un caso de autoignición de hidrógeno a altas presiones y distintas geometrías; por medio de la simulación de dinámica de fluidos computacional (CFD), basándose en conceptos de aerodinámica compresible, fenómenos de transporte y sistemas reactivos. Los resultados obtenidos son verificados con datos reportados en la literatura, y analizados para sugerir recomendaciones sobre el almacenamiento de hidrógeno comprimido.

En el primer capítulo se realiza la descripción del problema que aborda el presente trabajo de grado y se exponen algunos trabajos de investigación relacionados reportados en la literatura; en el segundo capítulo se explican diferentes conceptos teóricos sobre la autoignición y la simulación

con dinámica de fluidos computacional; en el tercer capítulo se detalla el caso de estudio y la configuración de las simulaciones para obtener los resultados; en el cuarto capítulo se analizan los resultados obtenidos y se verifican respecto a los datos reportados en la literatura del caso de estudio seleccionado; en el quinto capítulo se mencionan las conclusiones; y en el sexto capítulo se sugieren recomendaciones y trabajos futuros.

1.1. Planteamiento del Problema

Aunque el hidrógeno es el combustible con mayor densidad energética en términos másicos, su densidad es muy baja (0.0899 kg/m^3 a 0°C) [4]; por lo tanto, mientras más se comprima el hidrógeno se logra almacenar mayor cantidad de energía por unidad de volumen. A partir de la fuga repentina de hidrógeno y sin ninguna fuente de ignición, puede ocurrir el fenómeno de autoignición del hidrógeno [8].

Durante las últimas décadas, se han llevado a cabo distintos estudios en accidentes relacionados con hidrógeno, tanto por grupos industriales, como académicos. Y según el Servicio de Base de Datos de Incidentes Graves (MHIDAS), están registrados 81 incidentes relacionados con fugas de hidrógeno; de los cuales, el 86.3 % no tuvieron una fuente de ignición identificada [9]. Otro análisis de la Base de datos de Accidentes con Hidrógeno de la Universidad de Kingston expone que, en 419 incidentes la fuente de ignición no fue aclarada; entre otras posibles causas, la autoignición es una explicación razonable [8][10].

Al incrementar la presión del hidrógeno, más energía se podrá almacenar en la misma cantidad de volumen, pero a altas presiones aumenta el riesgo de la ocurrencia de autoignición. Debido a estas condiciones y a la cantidad de accidentes sin fuente de ignición identificada, es necesario investigar el comportamiento de la autoignición. Para este fin se han realizado experimentos, como usar discos de ruptura para la liberación repentina de presión [8], en conjunto con sensores de presión o cámaras para observar el experimento en orden de milisegundos; sin embargo, estas alternativas continúan siendo costosas.

Por último, la pregunta de investigación que se plantea y que es de interés para el autor responder es:

¿Cuál es la presión mínima a la que ocurre la autoignición en un escenario de almacenamiento de hidrógeno comprimido?

1.2. Estado del Arte

En esta sección se mencionan antecedentes sobre el estudio de la autoignición de hidrógeno comprimido, las primeras formulaciones, experimentales, y simulaciones.

En el año 1972, Wolanski y Wojciki fueron los primeros en demostrar la ignición difusiva introduciendo hidrógeno a alta presión a una cámara cilíndrica con oxígeno, desarrollando una teoría simple de ignición por difusión para correlacionar el retraso medido de la ignición como función de la propagación de la onda de choque resultante en el oxígeno; este fenómeno no fue estudiado en

otras geometrías ni usando el aire como oxidante [11].

Posteriormente en 1990 Chaineaux et al., reportaron la ignición casi instantánea en la descarga de hidrógeno de aproximadamente 100 atmósferas en aire, forzando el paso por un agujero circular de 12mm de diámetro que conectaba a una tubería de 120mm de largo y 15mm de diámetro. El experimento presentaba buena reproducibilidad, y la autoignición sólo ocurría con el hidrógeno como gas liberado y en ese montaje experimental específico. No se realizaron pruebas adicionales sobre el efecto de la geometría o análisis de las condiciones en las que ocurre la autoignición [12].

En 2001 Wang y Rehm, desarrollaron un código CFD (Dinámica de Fluidos Computacional) bidimensional para la simulación de flujos con reacciones químicas (SHOCKIN), para el cual usaron un modelo cinético de dos pasos y validaron con imágenes Schlieren y datos reportados en la literatura; lograron reproducir los fenómenos fisicoquímicos y encontraron que los resultados obtenidos dependen fuertemente del esquema cinético aplicado, por lo que sugirieron hacer una simulación más completa con un esquema cinético de combustión de hidrógeno mejorado [13].

En 2006 Liu et al., realizaron la simulación de las ecuaciones de Euler axisimétricas en dos dimensiones de la liberación de un chorro de hidrógeno de un tanque a alta presión, con un mecanismo de combustión detallado de 9 especies y 18 reacciones. Evaluaron 3 presiones 10MPa, 40MPa y 70MPa, analizaron cómo la generación de la onda de choque y la disminución rápida de la temperatura a estas condiciones afectan la generación de una llama de chorro [14].

Dryer et al., en 2006 concluyeron a partir de datos experimentales que la presión de almacenamiento mínima del hidrógeno a la que ocurre la autoignición, depende de las interacciones de las ondas de choque. Y a partir del modelo de onda de choque cuasi-unidimensional, estimaron que las descargas de metano y gas natural en el aire podrían resultar también en autoignición, aunque a presiones más altas respecto al hidrógeno. Por último, sugirieron que era necesario realizar más experimentos relacionados a determinar cuantitativamente la ocurrencia de autoignición a distintos rangos de parámetros del gas, como presión, temperatura, entre otros [15].

A continuación se encuentra una recopilación de distintos trabajos recientes de investigación numérica sobre la ignición espontánea del hidrógeno; y se analizan sus principales hallazgos, dificultades y recomendaciones.

(2020) Numerical study on the mechanism of spontaneous ignition of high-pressure hydrogen during its sudden release into a tube (Artículo): En este informe se investiga el mecanismo de ignición espontánea de hidrógeno a alta presión, técnica LES (Large Eddy Simulation), modelo de turbulencia RNG (Renormalization Group) y modelo de combustión EDC (Eddy Dissipation Concept), usando el software comercial FLUENT [16].

(2021) Effect of opening area on the suppression of selfignition of high-pressure hydrogen gas leaking in the air by an extension tube (Artículo): En este trabajo se propone un método para suprimir el fenómeno de autoignición, suprimiendo el área de apertura, el cual es analizado por simulaciones CFD con el software comercial CCM+ v14.02. Con esta supresión del área de apertura, la onda de choque es más débil, lo que produce mayor mezclado y por el contrario a lo propuesto, aumenta el riesgo de autoignición [17].

(2021) Kinetic analysis on spontaneous combustion of pressurized hydrogen in tubes (Artículo): Se estudia la autoignición con la versión 4 de OpenFOAM, se validan los resu-

tados de la simulación con la distancia de la ignición al disco de ruptura. Sólo se evalúa una geometría, y el solver utilizado es reactingFoam [18].

- (2022) **Numerical simulation on the spontaneous ignition of high-pressure hydrogen release through a tube at different burst pressures (Artículo):** OpenFOAM mezcla de los solvers reactingFoam and rhoCentralFoam, estima la temperatura más baja para inducir autoignición, para una sola geometría varía las presiones, determinando con cuáles ocurre la autoignición y con cuáles no [19].
- (2022) **Numerical simulation of the effect of multiple obstacles inside the tube on the spontaneous ignition of high-pressure hydrogen release (Artículo):** Se realiza un estudio numérico con el software FLUENT 18.0 de la ignición espontánea de hidrógeno a alta presión liberado repentinamente en una tubería con obstáculos en su interior. Se determina que las ondas de choque reflejadas afectan el mecanismo de autoignición del hidrógeno, y que mientras más cerca esté el obstáculo al disco de ruptura mayor será la onda de choque reflectada y por ende mayor posibilidad de ocurrencia de autoignición [20].
- (2023) **Influence of tube cross-section geometry on high-pressure hydrogen-flow-induced self-ignition (Artículo):** En este trabajo se compara la influencia del cambio de sección transversal en la ocurrencia de la autoignición, por medio de simulaciones numéricas en las que se libera hidrógeno que inicialmente está a 9 MPa, hacia una tubería de 150mm de largo. Los resultados son validados con datos reportados en la literatura y se encontró que la forma de la sección transversal no influye en el mecanismo de autoignición cerca del diafragma, pero sí afecta el comportamiento del crecimiento de la llama [21].
- (2023) **Physics of flame evolution following spontaneously combusting hydrogen emerging from a tube into the unconfined space (Artículo):** Con el uso de ANSYS FLUENT 19.0 se analiza la evolución de la llama producida por el escape de hidrógeno a través de una tubería hacia el exterior. Se determina que el tipo de evolución de la llama es determinado por la longitud del tubo [22].
- (2023) **Stochastic low-order modelling of hydrogen autoignition in a turbulent non-premixed flow (Artículo):** En este artículo se desarrolla un modelo estocástico utilizando modelado de red de reactor incompletamente mezclado (ISRN) para la autoignición en sistemas de flujo de gases sin mezclado previo, realizando fluctuaciones de temperatura, velocidad y composición y comparación con datos reportados en la literatura. El modelo resultante puede ser usado para determinar la sensibilidad de la autoignición ante las fluctuaciones de parámetros de entrada, de una forma factible computacionalmente [23].
- (2023) **Numerical study on the influence mechanism of different types of burst disc on high pressure hydrogen spontaneous combustion in tube (Artículo):** Se analiza el impacto de diferentes estructuras de discos de ruptura en la combustión espontánea de fugas de hidrógeno a alta presión por medio el software comercial FLUENT 22.1.0. Según los resultados obtenidos, la forma de las ranuras de los discos de ruptura afecta significativamente el tiempo requerido para la combustión espontánea [24].
- (2023) **Numerical study on the effects of rupture disk opening manner on high-pressure hydrogen release and spontaneous ignition (Artículo):** En este artículo se investiga el efecto entre dos discos de ruptura sobre la autoignición, el análisis realizado es

numérico. Los resultados obtenidos indican que la autoignición ocurre después y la llama es más débil cuando la ruptura del disco es en el centro del área transversal, respecto a la ruptura a lo largo de la circunferencia del disco [25].

(2024) Study on the characteristics and predictive model of autoignition induced by shock wave from high-pressure hydrogen leakage (Artículo): En este artículo se desarrolla un modelo para la autoignición del hidrógeno a partir de diferentes cambios geométricos y de presión. A partir del uso de la herramienta comercial FLUENT, para realizar simulaciones CFD [26].

Los trabajos recopilados en esta sección plantean distintas maneras numéricas de evaluar la autoignición de hidrógeno liberado a altas presiones. Se observa que la mayoría de estudios se realizan en aplicaciones comerciales y pocos estudios se llevan a cabo en programas de uso libre, como OpenFOAM. En las dos investigaciones recopiladas que usan OpenFOAM, el análisis y la verificación se restringen a una sola condición geométrica de longitud y diámetro de tubería.

En este trabajo se realiza la simulación de un escenario de autoignición de un flujo de hidrógeno alta presión que es liberado hacia la atmósfera, y el efecto de las variaciones geométricas del sistema en la presión umbral a la que ocurre la autoignición; usando la versión 11 del programa de código abierto OpenFOAM.

1.3. Justificación

Colombia tiene una ubicación privilegiada para ser uno de los principales países productores de hidrógeno verde a nivel regional; el cual puede servir como almacenamiento de energía y como precursor para la fabricación de otros compuestos importantes como el amoníaco y el metanol. En la hoja de ruta del hidrógeno en Colombia se plantea como metas a 2030 tener una capacidad instalada de 1-3GW para producción de hidrógeno de bajas emisiones, así como la implementación de estaciones de hidrógeno de acceso público; además de tener una flota de entre 1500-2000 vehículos ligeros y 1000-1500 vehículos pesados que funcionen a partir de celdas de combustible [5]. Actualmente en Colombia existen varios proyectos de hidrógeno para producción, transporte, almacenamiento, comercialización y exportación de hidrógeno en distintas partes del Caribe, Antioquia, Santander, y Bogotá D.C. [27].

Realizar estudios numéricos por medio de la dinámica de fluidos computacional con un programa de código abierto permite reducir los costos, y los riesgos asociados a la investigación experimental de la autoignición del hidrógeno a alta presión, mientras se pueden usar como herramienta de asistencia en el diseño de procesos y también planteamiento de medidas de mitigación ante accidentes. Las simulaciones realizadas en programas de código abierto son pocas en relación a los estudios realizados en programas comerciales, por lo que este estudio aportaría información sobre el uso del programa de código abierto OpenFOAM en estudios de autoignición del hidrógeno respecto a variaciones geométricas. Incluso, teniendo la posibilidad de utilizarse en otras áreas del conocimiento, como el análisis de inestabilidades de combustión en turbinas de gas o en sistemas de propulsión.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo General

Evaluar la presión umbral de autoignición del almacenamiento de hidrógeno mediante simulación de dinámica de fluidos computacional (CFD).

1.4.2. Objetivos Específicos

1. Establecer criterios para la selección de un escenario de simulación de almacenamiento de hidrógeno comprimido.
2. Proponer una simulación con CFD de un escenario de almacenamiento de hidrógeno comprimido.
3. Definir estrategias de operación en el almacenamiento de hidrógeno para reducir el riesgo de autoignición.

2. Marco Teórico

2.1. Gas Ideal

La energía interna consiste principalmente en dos partes, un aporte de la energía cinética, que está directamente relacionado con la temperatura del sistema, y un aporte de energía potencial molecular, que corresponde a las interacciones intermoleculares del sistema. El aporte de energía cinética es más importante a medida que la temperatura es más alta, y el aporte de energía potencial molecular es mayor cuando las moléculas están más cerca entre sí, es decir, a mayores presiones. Para un gas ideal, la energía interna depende exclusivamente de la temperatura, ya que se asume que no existen interacciones intermoleculares [28].

Cuando la presión del sistema es cercana a cero o cuando la temperatura es muy alta a presiones reducidas no muy altas, el aporte de energía potencial molecular a la energía interna es despreciable en comparación al aporte de la energía cinética, y se puede considerar que el gas tiene un comportamiento ideal [29], es decir que la Ecuación 2.1 representa sus propiedades.

$$Pv = RT \quad (2.1)$$

Donde P : presión del gas, v : volumen específico del gas, R : constante universal de los gases y T : temperatura del gas.

2.2. Combustión Espontánea

El hidrógeno es un combustible con una energía de combustión baja, un valor calorífico de combustión alto y un rango amplio de concentración de combustión, entre 4.0 %-74.6 % de hidrógeno en aire, concentración volumétrica. Para la explicación de la autoignición o combustión espontánea de fugas de hidrógeno de alta presión se han propuesto distintos mecanismos que se detallan a continuación [10]:

- **Efecto de Joule-Thomson:** El efecto Joule-Thomson ocurre por las interacciones intermoleculares de un gas, y consiste en el cambio de temperatura del gas al realizar un cambio de presión adiabático, definido en termodinámica por la relación presentada en la ecuación 2.2:

$$\mu_{J-T} = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_h = \frac{1}{C_P} \left[\left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P - v \right] \quad (2.2)$$

Donde μ_{J-T} es el coeficiente Joule-Thomson, T : temperatura, P : presión, h : entalpía, v : volumen específico y C_P es capacidad calorífica a presión constante.

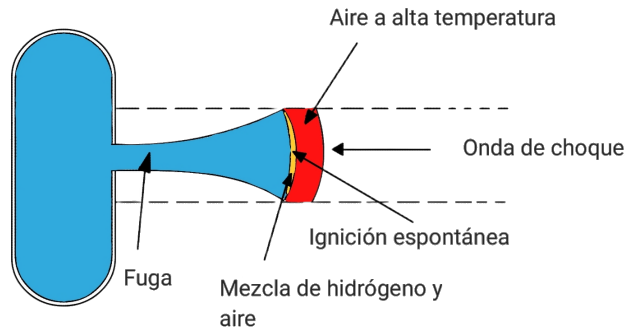


Figura 2.1: Mecanismo de autoignición por difusión. Fuente: Autor

De manera cuantitativa la descompresión adiabática del hidrógeno de 95MPa a 2MPa, sólo incrementa la temperatura 36.9K, lo que demuestra que el efecto Joule-Thomson no alcanza la temperatura de autoignición del hidrógeno (858 K en oxígeno y 943 K para un chorro de aire caliente que entra en contacto con el hidrógeno gaseoso) [30]; por lo que no es la causa de la ignición espontánea, aunque probablemente influye en el mecanismo [10].

- **Ignición electrostática:** En las tuberías pueden presentarse partículas por ingreso del exterior en el proceso de llenado o vaciado, también pueden producirse a partir de capas de óxido al interior de las tuberías. La falta de conexión a tierra puede causar que la carga de las partículas se acumule y se descargue en forma de una chispa, cuya energía liberada puede superar la energía mínima de ignición del hidrógeno en el aire que es 0.018 mJ [10].
- **Ignición por superficies calientes:** La mezcla de hidrógeno y aire entra en contacto con una superficie de alta temperatura, esto pudiendo causar la ignición de la mezcla. En presencia de un catalizador como el platino o el paladio, la temperatura de autoignición del hidrógeno en aire se reduce fuertemente [10].
- **Ignición por difusión:** El gradiente de presión provoca que el flujo de hidrógeno acelere a velocidades mayores a las del sonido en el medio y produzca una onda de choque, la cual aumenta la temperatura y promueve el mezclado del hidrógeno con el aire; una vez alcanzada la temperatura de autoignición del hidrógeno, que es aproximadamente 858 K y la concentración está dentro del rango de detonación (18.3 %-59 % Vol. %) [30] ocurre la ignición. En la figura 2.1 se muestra un esquema del mecanismo de autoignición por difusión. Una manera de analizar la forma en la que ocurre la autoignición por difusión es liberar hidrógeno a alta presión en un tubo que contiene aire. Sin embargo, en la práctica la mayoría de los escenarios de fuga no ocurren hacia un tubo sino directamente al ambiente externo [10][31].

Aunque la explicación más aceptada para la ignición espontánea es la autoignición por difusión, la ignición espontánea puede desarrollarse por el aporte de varios de los mecanismos mencionados ocurriendo a la vez.

2.3. Método de volúmenes finitos (FVM)

La dinámica de fluidos computacional consiste en el uso de simulaciones computacionales para analizar sistemas que están relacionados con el flujo de un fluido; abarcando fenómenos de transporte de masa, energía y momentum, así como sistemas reactivos. Este método de simulación numérica se usa en amplias áreas del conocimiento, como los procesos químicos en ingeniería, aerodinámica, hidrodinámica, ingeniería civil, ingeniería biomédica, entre otros [32].

El método de volúmenes finitos es uno de los métodos de dinámica de fluidos computacional, y consiste en discretizar el dominio geométrico en celdas que no se superponen y ocupan todo el espacio del dominio, resultando en una malla que se puede clasificar según su estructura, forma de las celdas, ortogonalidad, entre otros. Posteriormente se discretizan las ecuaciones diferenciales parciales de gobierno en ecuaciones algebraicas asociadas a los volúmenes finitos, también llamados elementos o celdas de la malla; en este paso se integran las ecuaciones diferenciales parciales para cada elemento y según las consideraciones asumidas, se obtienen esquemas de distintos órdenes y características, que son detallados en la sección 2.5. Por último, los sistemas de ecuaciones algebraicos se resuelven usando métodos numéricos, así obteniendo los valores de las variables en cada uno de los elementos de la malla discretizada inicialmente [33].

2.3.1. Ecuaciones de gobierno

Las ecuaciones de gobierno de un sistema son la representación matemática de la conservación de las leyes de la física. Principalmente en un sistema se conserva la masa, es decir no es creada ni destruida; la tasa de cambio de momentum es igual a la suma de las fuerzas del sistema y la tasa de cambio de energía es igual a la suma de la tasa de cambio de calor suministrado y la tasa de trabajo realizado en un sistema. Para el caso de un flujo reactivo, las ecuaciones de gobierno que lo representan se muestran a continuación [32]:

La ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (2.3)$$

Donde ρ : densidad, u : velocidad, x : posición espacial, t : posición temporal.

Momentum:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \quad (2.4)$$

Donde p : presión, F : fuerzas del cuerpo y τ_{ij} : el tensor de estrés viscoso, que se define como:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (2.5)$$

Transporte para la especie k :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega} \quad (2.6)$$

Y_k : concentración de la especie k , D_k : coeficiente de difusión de la especie k , y $\dot{\omega}_k$: término fuente debido a reacciones químicas.

Conservación de energía en términos de la entalpía:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{1}{Sc_k} - \frac{1}{\sigma_h} \right) \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right] \quad (2.7)$$

Donde h : entalpía, μ : viscosidad, σ_h : número Prandtl de la mezcla, Sc_k : número Schmidt de la especie k y S_{rad} : término fuente debido a la radiación.

2.4. Números adimensionales

Los números adimensionales son expresiones que provienen de organizar las ecuaciones de gobierno en formas adimensionales [33]. Estos números sirven para caracterizar fenómenos de manera general y hacer análisis comparativos entre las propiedades de los sistemas; como relaciones entre capas límites, difusividades, o regímenes de flujo. Algunos números adimensionales se mencionan a continuación:

2.4.1. Número de Prandtl:

Es un número adimensional que relaciona la capa límite hidrodinámica con la capa límite térmica. Está definido como la relación entre la viscosidad cinemática ν y la difusividad térmica α [33].

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu C_P}{k} \quad (2.8)$$

Donde k : conductividad térmica.

Cuando la capa límite térmica es más grande que la capa límite hidrodinámica $Pr < 1$, y cuando son iguales $Pr = 1$.

2.4.2. Número de Schmidt:

Este número adimensional relaciona la difusividad de momentum con la difusividad másica [33].

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (2.9)$$

Donde D : diámetro hidráulico del sistema.

A bajos valores de Sc predomina la transferencia de masa difusiva, y a altos valores de Sc predomina la transferencia de masa convectiva.

2.4.3. Número de Reynolds:

Este número adimensional puede interpretarse como una medición de la relación entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas de un fluido. Dependiendo del valor, se estima si el flujo es laminar, transicional o turbulento [33].

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (2.10)$$

Donde U : velocidad del fluido, L : Longitud característica del fluido, y μ viscosidad dinámica del fluido.

Para flujos en ductos, a valores de $Re < 2300$ predominan las fuerzas viscosas y el flujo es laminar; a valores de $2300 \leq Re \leq 4000$ el flujo está en transición de laminar a turbulento, y valores de $Re > 4000$ corresponden a flujos turbulentos [34]. Mientras que los flujos laminares son estables, los turbulentos son caóticos y causan mezclado rápido de las propiedades del fluido.

2.4.4. Número de Péclet:

Este numero relaciona la tasa de transporte advectivo respecto a la tasa de transporte conductivo de una propiedad física en un flujo. En la ecuación 2.11 se describe la ecuación del número Péclet para el transporte de masa.

$$Pe = Re \times Sc = \frac{UL}{D} \quad (2.11)$$

Valores altos del número de Péclet indican una alta dependencia de las propiedades del flujo aguas arriba, y una baja dependencia de las propiedades del flujo aguas abajo.

2.4.5. Número de Courant:

Este número representa una condición básica que debe cumplirse para tener estabilidad en la simulación. En la ecuación 2.12 se muestra la definición de la condición CFL (Courant-Friedrichs-Levy):

$$Co = \frac{U\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (2.12)$$

Donde Co es el número de Courant, U es la magnitud de la velocidad en la dirección de flujo, Δt es el paso temporal de la simulación, y Δx es el espaciado del elemento en la dirección de flujo.

La condición CFL establece que en cada paso temporal, la distancia en la cual se propagan las propiedades de manera convectiva no puede ser mayor al tamaño de un elemento en la dirección del flujo.

2.5. Esquemas de discretización

La discretización de las ecuaciones de gobierno consiste en transformar las ecuaciones diferenciales parciales de gobierno, en un conjunto de ecuaciones algebraicas para cada uno de los elementos que componen el dominio computacional. Algunas de las propiedades importantes de las ecuaciones discretizadas son [33]:

- **Conservación:** Esta propiedad consiste en que para todas las propiedades, el flujo saliendo de un volumen de control a través de una cara, debe ser igual al flujo ingresando al volumen de control adyacente a través de la misma cara.
- **Exactitud:** Se refiere a qué tan cerca una solución numérica a la solución exacta. Sin embargo, como en la mayoría de los casos la solución exacta del problema es desconocida, una alternativa es usar el error de truncamiento como una medida de la exactitud. El orden de exactitud de un esquema define al disminuir el tamaño de la celda qué tanto reduce el error. Un esquema de primer orden reduce a la mitad el error al reducir a la mitad el tamaño de los elementos, y un esquema de segundo orden reduce cuatro veces el error al reducir a la mitad el tamaño de los elementos.
- **Convergencia:** La naturaleza de la solución de las ecuaciones discretizadas, es iterativa, y se establece que hay convergencia cuando los cambios del resultado entre dos iteraciones consecutivas es menor a una cantidad despreciable.
- **Consistencia:** Una solución es consistente cuando al reducir el espaciado de la malla, y el paso temporal a valores cercanos a cero, la solución numérica se acerca a la solución exacta.
- **Estabilidad:** Si un esquema de discretización no satisface los criterios de estabilidad, posiblemente la solución obtenida presente oscilaciones o incluso que no haya convergencia alguna.

Las propiedades mencionadas anteriormente permiten tener criterios objetivos para seleccionar esquemas de discretización de las ecuaciones diferenciales parciales, dependiendo del caso analizado. A continuación se presentan algunos de los esquemas de discretización más usados, según el término discretizado de la ecuación:

1. **Término difusivo:** Por medio del uso del teorema de divergencia se obtienen expresiones discretas dependientes de los valores del flujo en las caras del elemento como se muestra en la ecuación 2.13. Y el gradiente resultante se puede computar principalmente de dos formas.

$$\nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) = \sum_N (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f \quad (2.13)$$

Donde ϕ es una variable escalar, Γ^ϕ es el coeficiente de difusión de la variable escalar, $\nabla \phi$ es el gradiente de la variable escalar, $\mathbf{S}_f$ es el vector normal de la superficie en la cara N , y N es el número de caras del volumen de control.

2. Computación del gradiente:

- **Gradiente de Green-Gauss:** También es derivado a partir del teorema del gradiente, y define el gradiente de una propiedad, como la suma del producto del vector normal unitario, el valor de la propiedad en el centro de la celda y el área de las caras del volumen de control, dividido sobre el volumen del elemento.

$$\nabla \phi_C = \frac{1}{V_C} \sum_N \phi_f \mathbf{S}_f \quad (2.14)$$

Donde ϕ_C es el valor de la variable escalar en el centro del elemento, $\nabla \phi_C$ es el gradiente de la variable escalar en el centro del elemento, y ϕ_f es el valor de la variable escalar en la cara N . El valor de la cara se puede obtener mediante el método basado en celdas, o el método basado en nodos; el primero presenta errores significativos en mallas

- **Gradiente de Mínimos Cuadrados:** Este método calcula el gradiente a partir de los valores de la propiedad en los nodos, y la distancia entre los nodos; más un termino de corrección en las caras de los volúmenes de control, para mallas no ortogonales.

El uso del método de mínimos cuadrados no es efectivo en discretizaciones sobre el nodo central en mallas no ortogonales; mientras que el método de Green-Gauss, representa adecuadamente los valores de los gradientes para todos los casos [35].

3. **Término convectivo:** Asumiendo el flujo en una dimensión, el número Péclet para una celda se define como:

$$Pe = \frac{\rho u \delta x}{\Gamma \phi} \quad (2.15)$$

Donde u , es el componente de la velocidad en la dirección x y δx es la longitud de la celda en la dirección x .

- **Esquema de Diferencia central:** Este esquema es obtenido asumiendo un perfil de interpolación lineal entre los nodos. Y el valor de la propiedad en la cara del volumen de control es calculada con una expansión de series de Taylor, truncada para términos de segundo orden o mayores. Este esquema es inestable, incurriendo en oscilaciones y comportamientos no físicos para números altos de Péclet. Disminuir el tamaño de celda en flujos altamente advectivos, para reducir el número de Péclet no es conveniente a nivel computacional.
- **Esquema Upwind:** Es un esquema estable de primer orden, pero no es exacto. Considera que el valor de la propiedad en la cara es el mismo del nodo aguas arriba, y no depende para nada del valor aguas abajo. El término difusivo que disminuye su exactitud, es el que lo hace estable ante cualquier condición.
- **Esquema Downwind:** Opuesto al esquema Upwind, considera que el valor de la propiedad en la cara es igual al valor de la propiedad en el nodo aguas abajo, ignorando las propiedades aguas arriba. Es un esquema anti difusivo y oscilatorio.
- **Esquemas Upwind de alto orden:** El objetivo de los esquemas de alto orden es tener soluciones numéricas con mayor exactitud mientras mantienen estabilidad numérica. Los esquemas Upwind de alto orden asumen un perfil de interpolación entre nodos, sesgado hacia las propiedades del nodo aguas arriba; esto logra parcialmente los objetivos de los esquemas de alto orden. Según el perfil de interpolación los métodos tienden a ser más exactos o más estables:
 - a) **Esquema Upwind de Segundo Orden (SOU, por sus siglas en inglés Second Order Upwind):** Asume interpolación lineal y es de segundo orden, tiende a ser más estable que los otros esquemas de alto orden, pero es más difusivo.
 - b) **Interpolación cuadrática aguas arriba para cinemática convectiva (QUICK, por sus siglas en inglés Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics):** Consiste en la interpolación cuadrática del valor de la variable dependiente con un sesgo hacia la dirección aguas arriba.
 - c) **Esquema Fromm:** Asume un perfil lineal, entre dos nodos adyacentes aguas arriba, y un nodo aguas abajo, siendo oscilatorio a valores altos de Pe .

- Esquemas de alta resolución: Son una combinación de esquemas de alta resolución con criterios de acotamiento convectivo. Existen principalmente dos formulaciones; formulación de variable normalizada (NVF, por sus siglas en inglés Normalized Variable Function), y disminución de la variación total (TVD, por sus siglas en inglés Total Variation Diminishing). Algunos de los esquemas de alta resolución son: SUPERBEE, MINMOD, OSHER, Van Leer y MUSCL.

4. Término transitorio:

- Forward Euler: Se basa en la expansión de Taylor hacia adelante en el tiempo truncada en los términos con derivadas de segundo orden y mayores ordenes. Posteriormente la derivada se evalúa numéricamente con el método de diferencias finitas. Es de primer orden, implícito y acotado [36].
- Backward Euler: Es derivado con un procedimiento similar al Forward Euler, pero la expansión de Taylor es hacia un paso temporal anterior. Es de segundo orden, y potencialmente oscilatoria.
- Crank Nicolson: Expresa La función en el tiempo hacia un paso adelante y un paso hacia atrás. Es implícito, de segundo orden y acotado. Este esquema requiere de un coeficiente entre 0 y 1, cuando se utiliza con valor 0, la expresión corresponde al mismo esquema Forward Euler, y cuando se utiliza 1, la expresión corresponde a CrankNicolson solamente.

2.6. Seulex

Seulex ([Stiff] linearly implicit EULER EXtrapolation), es un método para resolver ecuaciones diferenciales, y consiste en implementar el método Euler implícito usando distintas secuencias de pasos iterativos. Es un método apropiado para tolerancias rigurosas y para ecuaciones diferenciales explícitas rígidas [37].

2.7. Algoritmo PIMPLE

Es un algoritmo de acoplamiento de presión-velocidad, que consiste en la combinación de los algoritmos PISO (por sus siglas en inglés pressure-implicit split-operator), y SIMPLE (por sus siglas en inglés semi-implicit method for pressure-linked equations). En simulaciones transitorias, PIMPLE permite mejorar la exactitud al actualizar términos fuente explícitos [36].

3. Metodología

En este capítulo se detallan las actividades realizadas para simular la autoignición en un escenario de almacenamiento de hidrógeno comprimido. Primero se realiza la selección del caso de estudio a partir de unos criterios establecidos, para posteriormente realizar el planteamiento de la simulación CFD del caso seleccionado; que incluye la discretización del dominio y de las ecuaciones de gobierno, así como la configuración del software para la posterior ejecución de las simulaciones. Por último, los resultados son verificados con datos reportados del caso de estudio en la literatura y a partir del análisis de la presión umbral obtenida en los resultados, se mencionan recomendaciones para la operación en el almacenamiento de hidrógeno comprimido.

En la figura 3.2 se muestra el diagrama de flujo de las etapas principales de la metodología del proyecto.

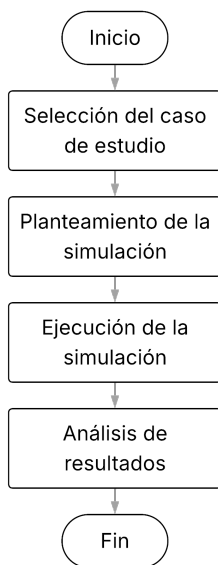


Figura 3.2: Diagrama de flujo de la metodología

A continuación en la tabla 3.1 se detallan las actividades de cada etapa definida en el diagrama de flujo de la metodología, requeridas para el cumplimiento de cada uno de los objetivos específicos planteados.

Objetivos Específicos	Etapas de ejecución	Actividades
Establecer criterios para la selección de un escenario de simulación de almacenamiento de hidrógeno comprimido	Selección del caso de estudio	Revisión bibliográfica para recopilar posibles escenarios de almacenamiento de hidrógeno comprimido a simular
		Definición de criterios para la selección del escenario a simular a partir de la base de datos recopilada
		Selección del escenario a simular con la elaboración de una matriz de decisión
Proponer una simulación con CFD de un escenario de almacenamiento de hidrógeno comprimido	Planteamiento de la simulación	Planteamiento de las suposiciones, condiciones iniciales y condiciones de frontera del escenario escogido para la simulación
		Selección del solucionador de OpenFOAM que cumpla con las suposiciones establecidas
		Modelado 3D de la geometría a simular con el uso de la herramienta blockMesh
		Análisis de independencia de malla y de independencia temporal
Definir estrategias de operación en el almacenamiento de hidrógeno para reducir el riesgo de autoignición	Ejecución de la simulación	Realizar la simulación a distintas presiones y condiciones geométricas
	Análisis de resultados	Verificación de la simulación con los datos reportados por el escenario seleccionado de la literatura
		Análisis del efecto de la presión en la ocurrencia de autoignición
		Elaboración de recomendaciones para la operación del almacenamiento de hidrógeno comprimido según los resultados del análisis realizado

Tabla 3.1: Etapas de la metodología para la realización de trabajo de grado

3.1. Selección del caso de estudio

Primero se realiza una revisión bibliográfica en las bases de datos Elsevier y Springerlink, para recopilar trabajos experimentales sobre autoignición por difusión que son posibles escenarios de simulación de almacenamiento de hidrógeno comprimido. Luego, para escoger el escenario a simular, se definen los siguientes criterios, en los que se otorga un valor entre 0 y 1:

- **Disponibilidad de los datos reportados en la literatura:** Este criterio se refiere a la manera en la que los datos están reportados en el artículo. Si se presentan gráficas, tablas o fotografías. La importancia de este criterio se debe a que estos datos se usarán para comparar la simulación, y es preferible tener los datos reportados en tablas con sus incertidumbres, para estimar la diferencia cuantitativa de la simulación respecto a los resultados experimentales. Por estas razones el puntaje favorece a gráficas, seguido de tablas y por último fotografías. En el caso de artículos que reporten los datos de distintas la calificación se suma. Vale el 30 % del ponderado total.
- **Claridad del montaje experimental:** Al momento de realizar la discretización espacial de la simulación, es necesario tener claridad en la geometría del montaje experimental, para así definir el problema, su dominio y las suposiciones. La calificación de esta categoría será mayor en los artículos que además de presentar figuras del montaje experimental, otorguen dimensiones del montaje. Los trabajos que detallen geometrías y dimensiones de los montajes experimentales, tendrán mayor valor. Vale el 20 % del ponderado total.
- **Variables independientes:** Los artículos que presenten la mayor cantidad de variables para evaluar sus efectos en los fenómenos relacionados a la autoignición, serán favorecidos en la

calificación. Ya que la mayor cantidad de información es útil para analizar el comportamiento de la autoignición ante mayor cantidad de cambios en el sistema, lo que es importante para desarrollar recomendaciones de almacenamiento y también para tener estimaciones en procesos de diseño. Las principales variables independientes manipuladas en los trabajos de investigación consultados son: Presión, longitud, diámetro y otras variaciones geométricas, como conexiones de accesorios en el extremo de la tubería de salida. Su peso es equivalente al 15 % del ponderado total.

- **Variables dependientes:** Los trabajos que más variables afectadas consideren son preferidos, ya que estos permiten hacer más comparaciones con los resultados obtenidos por simulaciones numéricas. Esto es conveniente para identificar qué suposiciones de un modelo pueden estar en conflicto con el fenómeno experimental. Las principales variables dependientes reportadas en los artículos consultados son: ocurrencia de autoignición, presión umbral de autoignición, geometría de la llama, y velocidad de la onda de choque. Vale el 15 % del ponderado total.
- **Actualidad del artículo:** Los estudios experimentales más recientes reportados en la literatura incorporan ideas novedosas, y además suelen resolver inconvenientes encontrados en estudios académicos anteriores, es por eso que se prefieren y se asigna mayor valor a los trabajos con menor tiempo de haber sido publicados. Los valores se asignarán de forma lineal, con valor de 0 para el artículo más antiguo, y valor de 1 para el más reciente. Vale el 20 % del ponderado total.

Para seleccionar el trabajo experimental sobre el cual se realiza la simulación, se calculó un promedio ponderado para cada una de las alternativas, y la que tuvo el mayor valor es la utilizada para el estudio numérico. El peso otorgado a la disponibilidad de los datos reportados en la literatura fue 30 %, a la claridad del montaje experimental 20 %, a las variables dependientes 15 %, a las variables independientes 15 % y a la actualidad del artículo 20 %. La información detallada de los valores asignados se encuentra en el apéndice A.

A partir de estos criterios, el artículo seleccionado para realizar las simulaciones es el estudio experimental sobre las características de la presión y de la llama, inducidas por la ignición espontánea de hidrógeno a alta presión (“Experiment study on the pressure and flame characteristics induced by high-pressure hydrogen spontaneous ignition”) [38], en el que se estudia la ocurrencia de la autoignición al liberar hidrógeno de alta presión en tuberías de distintas geometrías, los detalles se encuentran a continuación en la sección 3.2.

3.2. Descripción del sistema experimental

El montaje experimental del estudio seleccionado [38], consiste en un tanque con un volumen de un litro, en el cual se almacena hidrógeno con una pureza de 99.99 % a alta presión, en un rango de valores de 4-12 MPa. El tanque está conectado a una tubería de acero inoxidable 316L con las paredes internas pulidas, en la cual se encuentra un disco de ruptura de níquel diseñado para realizar la liberación del hidrógeno entre 4-12 MPa; 4 sensores de presión piezoresistivos (PCB, 113B22) en posiciones equidistantes para medir la velocidad y presión de la onda de choque y 4 fotodiodos (Thorlabs, FDS 010) que detectan la luz de la llama cuando ocurre la autoignición. El sistema está conectado a una bomba de vacío con la cual se elimina posible aire residual en

el sistema antes de realizar nuevas ejecuciones. En la Figura 3.3 se muestra la geometría que representa el montaje experimental del estudio escogido.

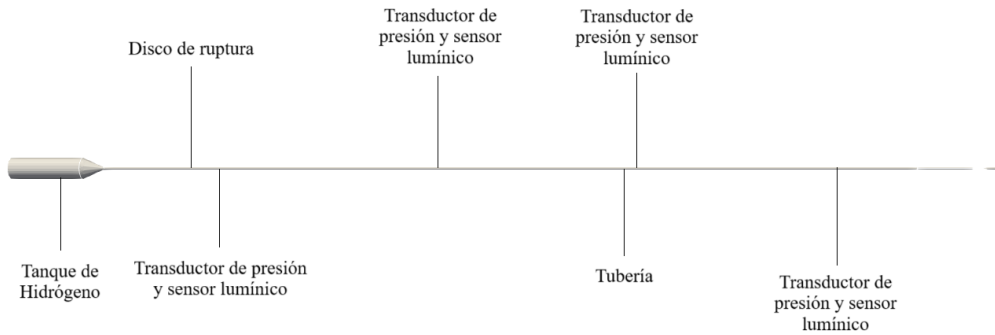


Figura 3.3: Montaje experimental. Fuente: Autor

El primer par de sensores se encuentra ubicado a 65mm del disco de ruptura, y los otros 3 pares están espaciados de manera uniforme según la longitud de la tubería en el montaje experimental, como se muestra en la Tabla 3.2.

Longitud de la tubería (mm)	Espaciado entre los sensores (mm)
300	60
700	193
1200	360
1700	527
2200	693
3000	960

Tabla 3.2: Espaciado de los sensores a distintas longitudes de tubería

La metodología de las pruebas experimentales realizadas consistió en llenar el tanque hasta que se quebrara el disco de ruptura, y se registró la medición de presión y de los foto diodos en el tiempo a medida que el gas escapaba hacia la atmósfera por medio de la tubería; una vez terminado el proceso, se vaciaba el sistema con la bomba de vacío. Este procedimiento se repitió para distintos diámetros (10mm y 15mm), y se estudian distintas longitudes de la tubería, 0.3 m, 0.7 m, 1.2 m, 1.7 m, 2.2 m y 3m.

Se obtuvieron como variables de respuesta la distribución de la presión en el tiempo, y la luminosidad captada en el tiempo, que define la ocurrencia de la autoignición y el tiempo en el que ocurría. Por último, con la distancia entre los sensores y la diferencia de tiempo entre del primer registro de presión de los sensores, se estimó una velocidad promedio de la onda de choque.

3.3. Pre-procesamiento

En esta sección se describe la etapa de pre-procesamiento, que consiste en las configuraciones previas a las ejecuciones de las simulaciones. Empezando por la fabricación de la geometría y su

discretización en una malla compuesta por hexahedros y prismas con la herramienta *blockMesh*; posteriormente en cada una de las celdas de la malla se realiza la discretización de las ecuaciones de gobierno que describen el fenómeno, estableciendo los esquemas de discretización según el término de la ecuación al que están relacionados. Luego se escogen los métodos numéricos para resolver los sistemas de ecuación resultantes, y se configuran las condiciones iniciales y de frontera en cada una de las celdas del dominio. Por último se realizan análisis de independencia de malla y de paso temporal.

3.3.1. Suposiciones del sistema

Con el fin de determinar las principales características del fenómeno y simplificar el modelo que se va a simular, se procede a hacer una serie de suposiciones. El estudio que se realiza en el presente trabajo se focaliza en la ocurrencia de la autoignición al interior de la tubería, más no al desarrollo de la llama en el exterior, luego de que la autoignición haya ocurrido. A continuación se presenta un listado con las demás suposiciones consideradas para el modelo.

- Fenómeno transitorio.
- Flujo compresible.
- Se asume que los componentes de la velocidad en los ejes y y z son despreciables, resultando en simetría axial sobre el eje x .
- La temperatura y la presión del ambiente son 300 K y 101325Pa respectivamente.
- Debido a las altas velocidades alcanzadas dentro de las tuberías, el fenómeno es turbulento. No obstante, debido a limitaciones de hardware, se realizan pocas simulaciones con flujo turbulento; y se analiza el comportamiento bajo la suposición de flujo laminar para el resto de los casos, con este criterio se pueden conocer las limitaciones que tiene esta suposición y hasta qué punto puede representar el comportamiento de la autoignición por difusión en el caso de estudio.
- Los gases presentes en el sistema inicialmente y hasta la ocurrencia de la autoignición son solamente hidrógeno, oxígeno y nitrógeno; los intermediarios y productos de la reacción se producen durante o después de la autoignición, no serán considerados debido a que el fenómeno de interés en este trabajo es la ocurrencia de la autoignición, y no la comparación de propiedades o concentraciones de especies después de la combustión. Con el fin de verificar si la suposición de gas ideal es apropiada para el caso de estudio, se procede a comparar para cada una de las especies, el volumen específico calculado con la Ecuación 2.1 y el volumen específico reportado en las tablas del NIST (por sus siglas en inglés de Instituto Nacional de Estándares y Tecnología) [39]; a una temperatura de 300K y en el rango de presiones de 1MPa a 12MPa. La diferencia absoluta porcentual se presenta en la figura 3.4:

En la Figura 3.4c se puede observar que el hidrógeno presenta la mayor desviación del comportamiento de gas ideal respecto al oxígeno y el nitrógeno. Estableciendo un criterio de diferencia máxima de 5 %, se puede asumir que los gases se comportan de manera ideal en el rango de presiones de 1-8.8MPa, para temperaturas iguales o superiores a 300K.

- El sistema es reactivo.

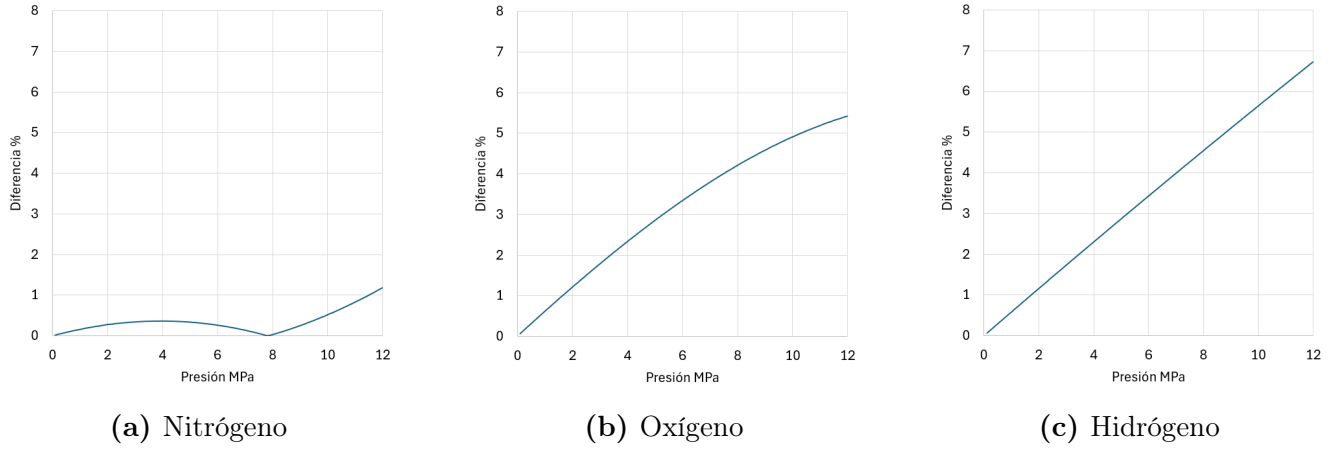


Figura 3.4: Diferencia absoluta porcentual volúmenes específicos gas ideal respecto a datos en NIST. Fuente: Autor

Para el modelo de combustión del hidrógeno en aire hay distintos mecanismos detallados, y reducidos. Los mecanismos detallados suelen representar de manera más exacta las características de la combustión del hidrógeno, como la velocidad de la llama, el tiempo de retraso de ignición, y la concentración de las especies en el producto de la reacción. Los modelos de mecanismos detallados requieren de mas tiempo de simulación, ya que la integración numérica involucra la naturaleza no lineal de las ecuaciones de Arrhenius que resultan en una alta rigidez del sistema de ecuaciones de gobierno [40]. En la ecuación 3.16 se presenta la forma de la ecuación de Arrhenius:

$$k = A \times \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.16)$$

Donde k es la constante de velocidad de la reacción, A es el factor preexponencial, E_a es la energía de activación, y R es la constante universal del los gases.

Inicialmente se optó por usar un mecanismo reducido para la combustión del hidrógeno, y los primeros mecanismos reducidos en ser considerados para el modelo del presente trabajo se muestran a continuación:

- Mecanismo de una sola reacción, de la forma Arrhenius, en el cual la energía de activación es función de la temperatura, la presión y el coeficiente de exceso de aire; en los rangos de 850-1750 K, 0.1-100 atm y 0.65-5 respectivamente [41].
- Mecanismo de una sola reacción, válida para rangos entre 870-1428 K, 1-50 atm, representando correctamente la temperatura de llama adiabática y la velocidad de llama. Pero que requiere de acoplar otro paso de reacción para estimar la autoignición [42].
- Mecanismos de reacción de tres pasos y cuatro pasos, con representación inexacta de la concentración de las especies menores de la reacción, pero con exactitud para representar la transferencia de energía y estudios de dinámica del gas como deflagración, detonación, ignición, y extinción [43][44].

Estos modelos reducidos podrían disminuir considerablemente el tiempo de simulación, sin embargo, para implementarlos se requiere de modificar el solver en OpenFOAM, y dicha actividad de modificar el solver no está dentro del alcance del presente trabajo.

Uno de los mecanismos de combustión detallados, que es válido para un gran rango de presiones (0.5-87 atm), es el propuesto por Conaire et al., [45]. Este mecanismo de combustión del hidrógeno consta de 19 reacciones elementales reversibles y reproduce satisfactoriamente los datos reportados en la literatura de combustión de hidrógeno en distintas características como velocidad de propagación de llama, retraso de ignición en un tubo de choque [46].

A continuación en la Tabla 3.3 se presenta el mecanismo de combustión del hidrógeno, el cual consta principalmente de reacciones en cadena de H_2/O_2 , disociación y recombinación de H_2/O_2 , formación y consumo de $H\dot{O}_2$ y formación y consumo de H_2O_2 . Posteriormente se presentan los factores de eficiencia y los parámetros de Troe de las ecuaciones correspondientes:

	Reacción	A	n	E
1	$\dot{H} + O_2 = \dot{O} + \dot{O}H$	1.91×10^{14}	0.00	16.44
2	$\dot{O} + H_2 = \dot{H} + \dot{O}H$	5.08×10^4	2.67	6.292
3	$\dot{O}H + H_2 = \dot{H} + H_2O$	2.16×10^8	1.51	3.43
4	$\dot{O} + H_2O = \dot{O}H + \dot{O}H$	2.97×10^6	2.02	13.4
5 ^a	$H_2 + M = \dot{H} + \dot{H} + M$	4.57×10^{19}	-1.40	105.1
6 ^b	$\dot{O} + \dot{O} + M = O_2 + M$	6.17×10^{15}	-0.50	0.00
7 ^c	$\dot{O} + \dot{H} + M = O\dot{H} + M$	4.72×10^{18}	-1.00	0.00
8 ^d	$\dot{H} + \dot{O}H + M = H_2O + M$	4.50×10^{22}	-2.00	0.00
9 ^{e,f}	$\dot{H} + O_2 + M = H\dot{O}_2 + M$	3.48×10^{16}	-0.41	-1.12
	$\dot{H} + O_2 = H\dot{O}_2$	1.48×10^{12}	0.60	0.00
10	$H\dot{O}_2 + \dot{H} = H_2 + O_2$	1.66×10^{13}	0.00	0.82
11	$H\dot{O}_2 + \dot{H} = \dot{O}H + \dot{O}H$	7.08×10^{13}	0.00	0.30
12	$H\dot{O}_2 + \dot{O} = \dot{O}H + O_2$	3.25×10^{13}	0.00	0.00
13	$H\dot{O}_2 + \dot{O} = H_2O + O_2$	2.89×10^{13}	0.00	-0.50
14 ^g	$H\dot{O}_2 + H\dot{O}_2 = H_2O_2 + O_2$	4.2×10^{14}	0.00	11.98
	$H\dot{O}_2 + H\dot{O}_2 = H_2O_2 + O_2$	1.3×10^{11}	0.00	-1.629
15 ^{h,e}	$H_2O_2 + M = \dot{O}H + \dot{O}H + M$	1.27×10^{17}	0.00	45.5
	$H_2O_2 = \dot{O}H + \dot{O}H$	2.95×10^{14}	0.00	48.4
16	$H_2O_2 + \dot{H} = H_2O + \dot{O}H$	2.41×10^{13}	0.00	3.97
17	$H_2O_2 + \dot{H} = H_2 + H\dot{O}_2$	6.03×10^{13}	0.00	7.95
18	$H_2O_2 + \dot{O} = \dot{O}H + H\dot{O}_2$	9.55×10^{06}	2.00	3.97
19 ^g	$H_2O_2 + \dot{O}H = H_2O + H\dot{O}_2$	1.0×10^{12}	0.00	0.00
	$H_2O_2 + \dot{O}H = H_2O + H\dot{O}_2$	5.8×10^{14}	0.00	9.56

Tabla 3.3: Mecanismo de reacción de combustión del hidrógeno propuesto por Conaire, et al. con unidades $cm^3, mol, s, kcal, K$. Tomado de: [46]

^aLos factores de eficiencia $H_2O = 12.0$; $H_2 = 2.5$

^bLos factores de eficiencia son $H_2O = 12.0$; $H_2 = 2.5$; $Ar = 0.83$; $He = 0.83$

^cLos factores de eficiencia son $H_2O = 12.0$; $H_2 = 2.5$; $Ar = 0.75$; $He = 0.75$

^dLos factores de eficiencia son $H_2O = 12.0$; $H_2 = 0.73$; $Ar = 0.38$; $He = 0.38$

^eParámetros de Troe: reacción 9, $a = 0.5$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-30}$, $T^* = 1.0 \times 10^{+30}$, $T^{**} = 1.0 \times 10^{+100}$; reacción 15, $a = 0.5$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-30}$, $T^* = 1.0 \times 10^{+30}$

^fLos factores de eficiencia son $H_2O = 12.0$; $H_2 = 2.5$; $Ar = 0.75$; $He = 0.75$

^gLas reacciones 14 y 19 se expresan como la suma de las dos expresiones.

^hLos factores de eficiencia son $H_2O = 12.0$; $H_2 = 2.5$; $Ar = 0.45$; $He = 0.45$

3.3.2. Elaboración de la geometría

En OpenFOAM, las simulaciones en dos dimensiones, requieren de mallas de tres dimensiones, con una celda de espesor en la dirección de la simetría; por eso la geometría que se realiza es tipo *wedge* o cuña, que se muestra en la figura 3.5. Para dicho fin se requiere inicialmente definir todos los vértices de la geometría:

En la figura 3.5 se muestran los vértices de la geometría del sistema,

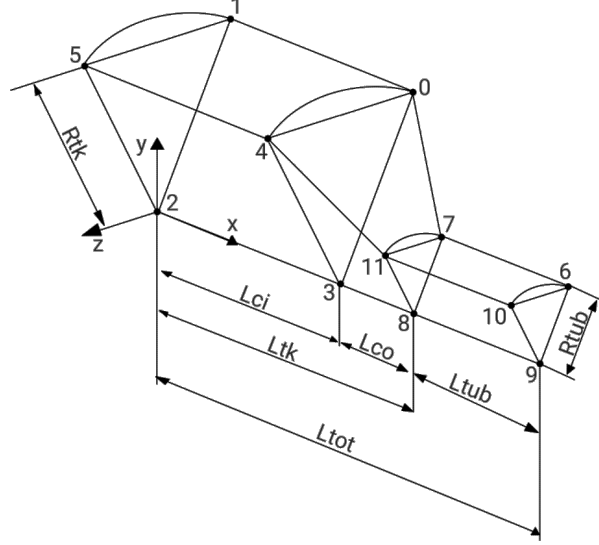


Figura 3.5: Vértices y orden de numeración de las caras. Fuente: Autor

Cada vértice está definido con las coordenadas cartesianas de su posición, como se detalla en la siguiente Tabla 3.4

Vértice	Coordenadas (x,y,z)
0	$(L_{ci}, R_{tk}, MT_{kw})$
1	$(0, R_{tk}, MT_{kw})$
2	$(0, 0, 0)$
3	$(L_{ci}, 0, 0)$
4	(L_{ci}, R_{tk}, Tk_{w})
5	$(0, R_{tk}, Tk_{w})$
6	$(L_{tot}, R_{tub}, MT_{ubw})$
7	$(L_{tk}, R_{tub}, MT_{ubw})$
8	$(L_{tk}, 0, 0)$
9	$(L_{tot}, 0, 0)$
10	$(L_{tot}, R_{tub}, Tub_{w})$
11	$(L_{tk}, R_{tub}, Tub_{w})$

Tabla 3.4: Coordenadas de cada uno de los vértices de la geometría, en el plano (zy) evaluado en $x = L_{tot}$

Donde L_{ci} : longitud de la sección cilíndrica del tanque, L_{co} : longitud de la sección cónica del tanque, $L_{tk} = L_{ci} + L_{co}$: longitud total del tanque, L_{tub} : longitud de la tubería, $L_{tot} = L_{tk} + L_{tub}$: longitud total del sistema, R_{tk} : radio del tanque, y R_{tub} : radio de la tubería. Estos son valores

conocidos para cada geometría a realizar, y realizar cambios entre distintas simulaciones solamente implica editar estas variables, sin tener que configurar de nuevo todo el archivo.

Los valores de las variables Tkw , $MTkw$, $Tubw$ y $MTubw$ corresponden a la distancia frontal y hacia atrás que se extiende la cuña para la simetría axial a la altura del tanque y a la altura de la tubería respectivamente. Se calculan con las siguientes expresiones, obtenidas al ver la geometría desde el plano zy , como se expone en la Figura 3.6:

$$Tkw = Rtk \times \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$MTkw = -Tkw$$

$$Tubw = Rtub \times \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$MTubw = -Tubw$$

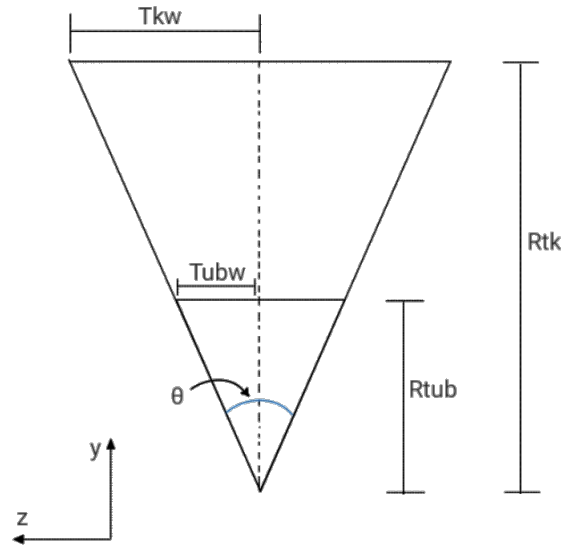


Figura 3.6: Cálculo de las variables del eje z. Fuente: Autor

Según las instrucciones de OpenFOAM [36], el ángulo θ debe ser menor a 5° , por lo que se estableció un ángulo de 3° .

Posteriormente, se conforman hexaedros a partir de los vértices siguiendo el orden mencionado en la guía instrucciones de la documentación, y se asignan cantidades de elementos en los ejes para la elaboración de la malla, así como dos vectores normales para la identificación del orden de numeración de los vértices al definir las caras como se observa en la tabla 3.5. Las caras se definen nombrando 4 vértices en sentido antihorario tomando como referencia el vector normal apuntando hacia el exterior de la cara; y se les asigna un tipo de frontera según el sistema. Enumerar cada una de las caras de acuerdo a los vértices asociados a ellas.

- Front (Cara frontal): La parte frontal consiste de tres caras, (5 2 3 4), (4 3 8 11) y (11 8 9 10)
- Back (Cara trasera): La parte trasera consiste de tres caras, (1 0 3 2), (0 7 8 3) y (7 6 9 8)

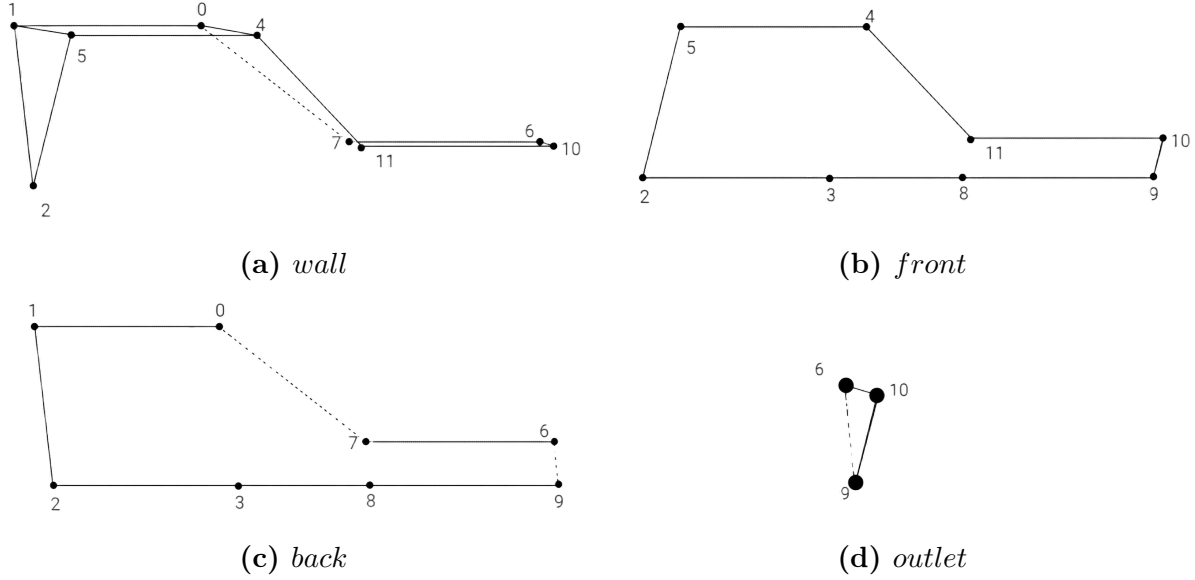


Figura 3.7: Definición de las caras del sistema. Fuente: Autor

- axis (Eje): El eje está compuesto por tres caras (2 3 3 2), (3 8 8 3), (8 9 9 8)
- wall (Pared): La pared consiste de 4 caras, (2 5 1 2), (1 5 4 0), (0 4 11 7) y (7 11 10 6)
- outlet (Salida): Consiste de una sola cara (9 9 6 10)

Por último, se construyen los bloques de la geometría, que son un conjunto de hexahedros conformados por las caras definidas. Cada bloque es conformado por 8 vértices que componen 6 caras. Los vértices se deben especificar en sentido horario respecto al eje que apunta en dirección normal a cada una de las caras [32]. En caso de nombrar los vértices en orden incorrecto, los vectores normales a las caras pueden apuntar en direcciones distintas, generando una malla en la cual la figura no es cerrada.

En la figura 3.8 se muestran los tres bloques definidos para esta geometría, que tendrán especial importancia en el proceso de generación de la malla.

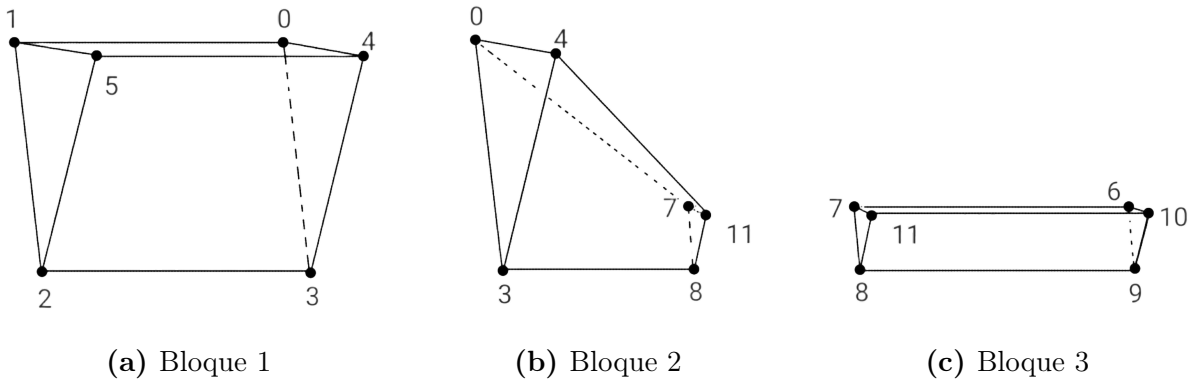


Figura 3.8: División de la geometría a simular en 3 bloques de 6 caras. Fuente: Autor

3.3.3. Generación de la malla

Para generar la malla de la geometría del caso laminar, se procede con un proceso iterativo, el cual consiste en los siguientes pasos:

1. Establecer el espaciado mínimo de los elementos en la dirección x , para el bloque 3 Δx_3
2. Se asume que $\Delta y_3 = \Delta x_3$, para que la relación de aspecto de los elementos sea 1.
3. Se calcula el número de elementos en el eje y , realizando la operación $n_y = \frac{Rtub}{\Delta y_3}$
4. Como el número de elementos en el eje y es el mismo para todos los bloques, ahora se procede a hallar $\Delta y_1 = \frac{Rtk}{n_y}$
5. Nuevamente con el fin de mantener una relación de aspecto igual a 1; $\Delta x_1 = \Delta y_1$
6. Derivando a partir del crecimiento de las celdas, se tiene que

$$Lco = \sum_{i=0}^{n_{x2}} \Delta x_1 \times G^{i-1}$$

y además que

$$\Delta x_3 = \Delta x_1 \times G^{n_{x2}-1}$$

por lo que se emplea un método iterativo para encontrar los valores del número de elementos en el eje x en el bloque 2 de la geometría, n_{x2} y la constante de incremento del tamaño en el eje x de los elementos G , que sean solución para las dos expresiones. $Grad_x$ es la graduación del tamaño de los elementos en el eje x , y se define como $Grad_x = \frac{\Delta x_3}{\Delta x_1}$, por lo que siempre es mayor a cero, y menor a 1. Y n_{x2} , es un número entero positivo.

7. Luego se calculan las variables $n_{x1} = \lceil \frac{Lci}{\Delta x_1} \rceil$, $n_{x3} = \lceil \frac{Ls+Ltub}{\Delta x_3} \rceil$; se utiliza la función techo, porque se requiere que sean números enteros, y es preferible tener más elementos y subestimar el tamaño de elemento que sobreestimarlos.

En la discretización del caso turbulento la malla se refina cerca a la pared de la tubería para modelar la capa límite del flujo; y el tamaño de los elementos en la dirección y aumenta de manera progresiva a medida que están más lejos de la pared como se observa en la figura 3.9b. Los pasos 3 al 5 se reemplazan por los siguientes pasos:

3. Primero se establecen el tamaño mínimo de elemento del eje y , Δy_{min} , y la constante de incremento de los elementos: G_y .
4. Con esta información y las siguientes expresiones, se realiza un proceso iterativo para calcular el tamaño máximo de elemento Δy_{max} , el número de elementos en el eje y n_y y la graduación del tamaño de los elementos G_y .

$$\Delta y_{max} = G_y^{n_y-1} \times \Delta y_{min}$$

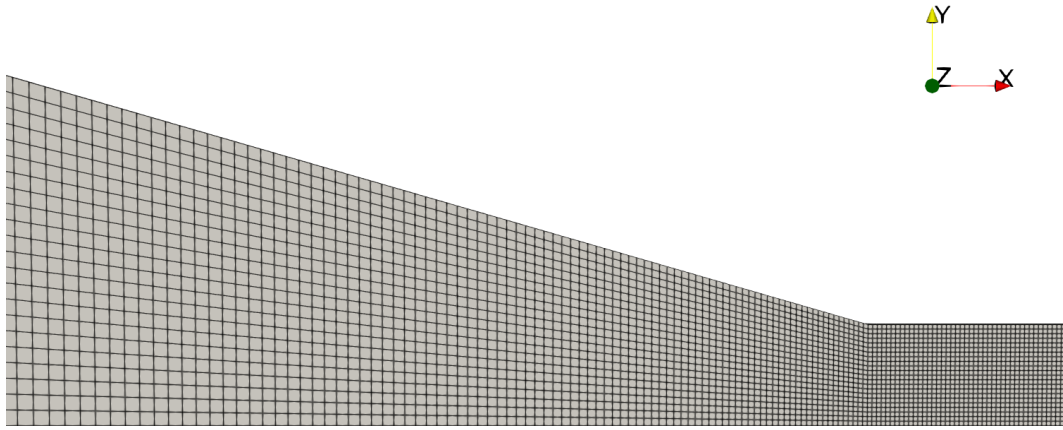
$$\sum_{i=0}^{n_y} G^i = \frac{2Rtub}{\Delta y_{min}}$$

$$Grad_y = \frac{\Delta y_{min}}{\Delta y_{max}}$$

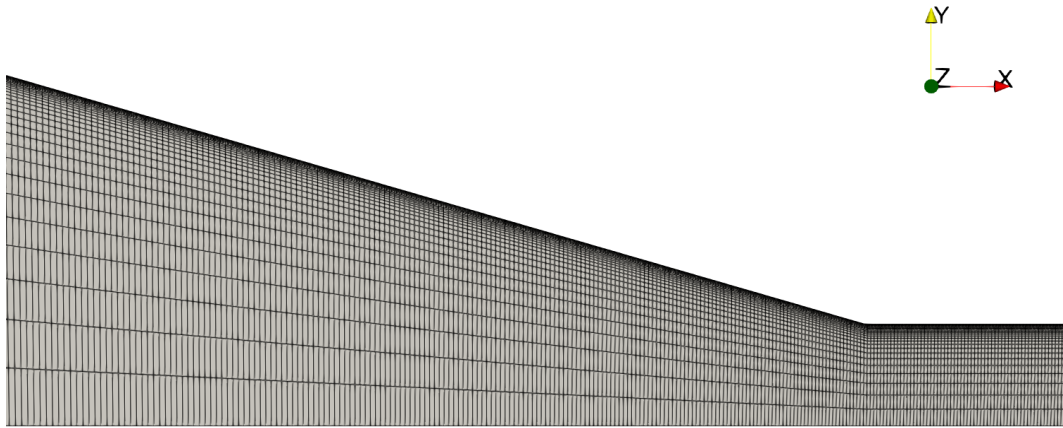
5. Se establece una relación de aspecto igual a 1 con el tamaño máximo de elemento en el eje y : $\Delta x_1 = \Delta y_{max}$.

Con esta metodología sólo es necesario especificar y cambiar los valores de R_{tub} , L_{tub} , L_{ci} , L_{co} , L_s , Δy_{min} , G_y y Δx_3 para obtener la geometría y la malla del sistema, sólo teniendo que ejecutar el comando *blockMesh* cada que se requiera actualizar los cambios, sin necesidad de recurrir a procedimientos complejos.

En las Figuras 3.9a y 3.9b se muestra una vista ampliada en el bloque 2 de las mallas generadas, para el caso laminar y turbulento respectivamente.



(a) Caso laminar



(b) Caso turbulento

Figura 3.9: Mallas generadas con la herramienta *blockMesh*, para dos casos distintos. Fuente: Autor

La calidad de la malla se puede revisar con la función *checkMesh* que viene preconstruida en OpenFOAM, que retorna varias especificaciones de la malla, sugiriendo si tiene algún error.

3.3.4. Condiciones iniciales y de frontera

Según las partes del dominio discretizado, se usan distintas condiciones de frontera para especificar información con la que se resolverá el sistema de ecuaciones discretizadas. Con base en la suposición de simetría axial, la cara frontal y la trasera tienen la condición de frontera *wedge*, mientras que el eje tiene la condición de frontera *axis*, las demás caras se especifican de la siguiente forma:

El gradiente es cero en todas las demás caras para las fracciones de las especies, porque no hay flujo ingresando al sistema, las paredes no tienen influencia en la reacción, y el flujo en la salida es libre. En la pared, la velocidad del flujo es cero, y se establece la condición *noSlip*, y la presión no cambia en esa zona, por lo que se establece la condición *zeroGradient*. Las condiciones y valores de las variables turbulentas fueron calculadas con las ecuaciones del marco teórico.

A continuación, se presentan las condiciones de frontera para las variables en las tablas 3.5 y 3.6:

Cara	H_2	N_2	O_2	p	T	U	Ydefault
outlet	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>waveTransmissive</i>	<i>advective</i>	<i>waveTransmissive</i>	<i>zeroGradient</i>
wall	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>noSlip</i>	<i>zeroGradient</i>
front	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>
back	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>
axis	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>

Tabla 3.5: Condiciones de frontera para las distintas variables

Cara	k	omega	nut	alphat
outlet	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>calculated</i>
wall	<i>kqRWallFunction</i>	<i>omegaWallFunction</i>	<i>nutkWallFunction</i>	<i>compressible::alphatWallFunction</i>
front	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>
back	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>	<i>wedge</i>
axis	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>

Tabla 3.6: Condiciones de frontera para las distintas variables de turbulencia

Para los valores iniciales de las variables turbulentas, se usaron las ecuaciones del marco teórico con valores de densidad teniendo en cuenta las propiedades estimadas a las condiciones esperadas que resulten en un mayor número de Reynolds; la mayor densidad esperada en el sistema es $\rho = 6.7 \frac{kg}{m^3}$ (para el aire a 300 K) y la menor viscosidad dinámica esperada en el sistema es $\mu = 4.5 \times 10^{-7} \frac{kg}{m.s}$ (para el hidrógeno a 3000 K). Los valores iniciales calculados se presentan en la tabla ??.

Variable	10mm	15mm
Re	233333333	335000000
k	$709.59 \frac{m^2}{s^2}$	$642.74 \frac{m^2}{s^2}$
omega	$38054.47 \frac{1}{s}$	$24145.06 \frac{1}{s}$
nut	$0.0186 \frac{m^2}{s}$	$0.0266 \frac{m^2}{s}$

Tabla 3.7: Valores iniciales estimados de las variables de turbulencia

En las condiciones de frontera de las caras donde el flujo es supersónico, puede ocurrir la reflexión de la onda de presión, lo que resulta en un aumento artificial de la presión y el cambio de las demás variables en respuesta. Para evitar la reflexión de la onda de presión se implementan las condiciones de frontera mixtas *waveTransmissive* y *advective*. La forma correcta de usar condiciones de frontera no reflectivas en OpenFOAM es aplicar la condición *waveTransmissive* a la presión y la velocidad, y la condición de frontera *advective* para las otras variables, en este caso la temperatura [47].

Para las condiciones iniciales, en el archivo de cada variable se establecen valores para todas las celdas con la configuración *uniform*; se establecen campos uniformes de temperatura 300 K, fracciones másicas: hidrógeno 0, nitrógeno 0.77, oxígeno 0.23, Ydefault 0, presión 101325 Pa, U (0 0 0). En caso de requerir que las celdas tengan valores distintos según su posición, se utiliza la herramienta *setFields*, la cual a partir de un criterio modifica los valores de las variables en las celdas seleccionadas.

En este trabajo, las celdas dentro del cilindro con eje entre los puntos (0,0,0) y (L_{tk} ,0,0) y con un radio R_{tk} , corresponden a la sección aguas arriba del disco de ruptura; para estas celdas se modifica la composición másica de Hidrógeno a 1, y el valor de la presión es establecido entre el rango de 1MPa a 8.8MPa según la simulación. La función *setFields* establece una distribución de valores no uniforme en el dominio.

3.3.5. Selección del solucionador

Se usa el solver *multicomponentFluid* del software OpenFOAM en la versión 11 de “The OpenFOAM Foundation”, ya que permite resolver sistemas reactivos de múltiples componentes, con distintas configuraciones sobre el régimen de flujo, compresibilidad, radiación, entre otros. El sistema se resuelve con múltiples procesadores, descomponiendo el dominio en secciones con aproximadamente el mismo número de elementos con el método *scotch*.

La carpeta del caso se contiene varias subcarpetas y archivos, la subcarpeta “0” contiene archivos con las condiciones iniciales y de frontera para cada una de las variables, la subcarpeta “constant” contiene la geometría y malla realizada las configuraciones de las propiedades de transporte, y las propiedades termodinámicas; la subcarpeta “system” contiene la configuración del solver escogido, los tiempos de simulación, los esquemas de discretización, los métodos numéricos de solución y configuraciones funciones adicionales, como la descomposición del caso para simulación paralela, el cambio de valores en elementos seleccionados del dominio y la elaboración de la geometría y la malla.

Las simulaciones se realizaron en un servidor comercial del proveedor Koyeb y los costos fueron asumidos por el autor del trabajo de grado. Se adquirió un servicio limitado con 32 núcleos de un procesador AMD EPYC 7413 que tiene una frecuencia de 2.5GHz, a una tarifa aproximada de 0.9 dólares estadounidenses por cada hora de simulación. Las simulaciones realizadas requirieron de varias horas para la aproximación de régimen laminar; y se estimó que con el recurso computacional disponible, el precio y tiempo necesarios para hacer todas las simulaciones con régimen turbulento no eran permisibles, como se discute en la sección 4.1 Tiempo de simulación.

3.3.6. Selección de los esquemas de discretización

Los esquemas de discretización fueron seleccionados conforme al comportamiento altamente convectivo del fenómeno, y las suposiciones realizadas:

- **Esquema temporal:** Se utilizó CrankNicolson con el coeficiente 0.9, es decir, más cerca de CrankNicolson, sin serlo absolutamente, para reducir la inestabilidad de la solución.
- **Esquema para gradiente:** Gauss linear.
- **Esquema para divergencia:** Se seleccionó el esquema Van Leer por ser un esquema de alto orden con TVD apropiado.
- **Esquema para laplaciano:** Se escoge Gauss linear limited 1, que tiene correcciones para la no ortogonalidad de la malla.
- **Esquema para el gradiente normal a la superficie:** Limited 1.

3.3.7. Métodos numéricos

Para el algoritmo de acoplamiento presión-velocidad se utilizó PIMPLE porque en conjunto con un esquema temporal de segundo orden permite mantener exactitud temporal a mayores valores de Couran; se configuró con 2 correctores internos que es el número de veces que se resuelven las ecuaciones de presión y el corrector de momentum por cada iteración temporal y 2 correctores externos que habilita la iteración de todo el algoritmo resolviendo nuevamente la ecuación de energía y ejecutando otra vez los correctores internos; además se habilitan el predictor de momentum y la corrección de flujo transónico. De esta forma se mejora la estabilidad de la simulación y se mejora la exactitud de los resultados. Para obtener la solución de los esquemas discretizados, se utilizó el algoritmo PBiCGStab (por sus siglas en inglés Stabilised preconditioned (bi-)conjugate gradient) o gradiente bi-conjugado preconditionado estabilizado, que es un algoritmo para resolver sistemas de ecuaciones lineales ofreciendo convergencia más rápida respecto a otros algoritmos, es estable y funciona para matrices simétricas y asimétricas. Se configuran los métodos forzando un mínimo de 3 iteraciones para estabilizar la solución. Para la solución de la cinética química en cada iteración se seleccionó el algoritmo Seulex al ser apropiado para sistemas de ecuaciones rígidos.

3.3.8. Propiedades termodinámicas y de transporte

En las configuraciones de las propiedades termodinámicas de las sustancias, se escoge la opción hPolynomial, la cual requiere coeficientes de un polinomio para hallar los valores de la capacidad calorífica a presión constante a las condiciones de la simulación, además requiere de la especificación de la entalpía de formación y la entropía de formación de las sustancias. Además, el modelo de transporte polinomial requiere de la especificación de los coeficientes polinomiales para la viscosidad y la conductividad térmica. Esta información fue obtenida de un reporte técnico de la Administración Nacional de Aeronáutica y el Espacio (NASA) [48] para un rango de temperatura entre 300K y 5000K.

Para el caso de OpenFOAM, los polinomios se ajustan a la forma:

$$f(T) = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4 + a_5T^5 + a_6T^6 + a_7T^7$$

Donde $f(T)$ es la propiedad calculada como función de la temperatura, sea capacidad calorífica, viscosidad o conductividad térmica, a_k son las constantes del polinomio, y el subíndice k expresa en qué grado del polinomio multiplica a la variable. Las unidades de las constantes para la capacidad calorífica son $\frac{J}{kg \cdot K^{i+1}}$, para la viscosidad $\frac{Pa \cdot s}{K^i}$ y para la conductividad térmica $\frac{W}{m \cdot K^{i+1}}$; para todas las expresiones mencionadas i corresponde al grado de cada una de constantes en el polinomio.

Especie	Entalpía de formación	Entropía de formación
OH	2313394.83	10792.52
N_2	0	6834.56
H_2O_2	-4007141.59	6845.27
O_2	0	6406.99
H_2	0	64776.99
HO_2	380262.64	6936.42
O	15573070.20	10057.67
H_2O	-13422559.45	10474.35288
H	216267889.12	113697.01
AR	0	3873.14

Tabla 3.8: Entalpía y entropía de formación para distintas especies [48].

Especie	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
OH	1861.1	-5.7652e-01	7.8950e-04	-3.0844e-07	4.0449e-11	0	0
N_2	985.73	9.9173e-02	1.5568e-04	-9.4065e-08	1.4613e-11	0	0
H_2O_2	808.03	1.741	-9.5771e-04	2.7845e-07	-3.2344e-11	0	0
O_2	763.84	5.7792e-01	-3.5306e-04	1.1014e-07	-1.2904e-11	0	0
H_2	14973	-2.777	4.1632e-03	-1.5065e-06	1.8466e-10	0	0
HO_2	762.17	1.1602	-6.6388e-04	2.0934e-07	-2.5951e-11	0	0
O	1505.9	-7.3178e-01	1.1150e-03	-8.8684e-07	3.8231e-10	-8.4536e-14	7.5219e-18
H_2O	1764.2	1.1848e-01	6.9381e-04	-3.2828e-07	4.5238e-11	0	0
H	20621.27	0	0	0	0	0	0
AR	520.30139	0	0	0	0	0	0

Tabla 3.9: Coeficientes polinomiales para la estimación de la capacidad calorífica a presión constante, de distintas sustancias [48].

Especie	a_0	a_1	a_2	a_3
OH	4.3507e-07	2.2026e-10	-7.1218e-14	8.3702e-18
N_2	4.9113e-07	1.4913e-10	-4.5334e-14	5.2444e-18
H_2O_2	3.5966e-07	2.2756e-10	-7.2505e-14	8.4182e-18
O_2	5.0415e-07	1.5409e-10	-4.7107e-14	5.4497e-18
H_2	4.1955e-07	1.4866e-10	-4.3828e-14	4.9948e-18
HO_2	4.3507e-07	2.2026e-10	-7.1218e-14	8.3702e-18
O	5.0065e-07	1.5111e-10	-4.3704e-14	4.9459e-18
H_2O	4.0798e-07	2.5295e-10	-8.2918e-14	9.7464e-18
H	4.0958e-07	1.0752e-10	-2.1606e-14	1.8566e-18
AR	5.3355e-07	1.0724e-10	-2.4072e-14	2.2637e-18

Tabla 3.10: Coeficientes polinomiales para calcular la viscosidad de distintas especies [48].

Especie	a_0	a_1	a_2	a_3
OH	5.2159e-04	2.2682e-07	-6.8859e-11	7.7778e-15
N_2	5.1754e-04	1.7981e-07	-5.4915e-11	6.2896e-15
H_2O_2	4.0320e-04	2.9552e-07	-9.6058e-11	1.1190e-14
O_2	5.2099e-04	1.8671e-07	-5.7808e-11	6.7572e-15
H_2	7.1799e-04	1.5777e-07	-4.2071e-11	4.5046e-15
HO_2	5.2159e-04	2.2682e-07	-6.8859e-11	7.7778e-15
O	5.6729e-04	1.5122e-07	-4.3752e-11	4.9523e-15
H_2O	4.5382e-04	3.1348e-07	-9.5279e-11	1.0781e-14
H	7.5277e-04	1.0752e-07	-2.1606e-11	1.8566e-15
AR	4.9031e-04	1.5766e-07	-4.8913e-11	5.7113e-15

Tabla 3.11: Coeficientes polinomiales para calcular la conductividad térmica de distintas especies [48].

Cantidad de elementos	Espaciado mínimo (mm)	Paso temporal (s)
7340	0.5	5×10^{-8}
15064	0.34	3.4×10^{-8}
30480	0.24	2.4×10^{-8}

Tabla 3.12: Cantidades de elementos y características de los elementos para distintos refinamientos de la malla caso laminar.

Cantidad de elementos	Δx_{min} (mm)	Δy_{min} (mm)	y_{max}^+	Paso temporal (s)
33540	0.5	9.96×10^{-4}	200	5×10^{-8}
66729	0.25	9.96×10^{-4}	200	3.4×10^{-8}
132741	0.138	4.98×10^{-4}	100	2.4×10^{-8}

Tabla 3.13: Cantidades de elementos y características de los elementos para distintos refinamientos de la malla caso turbulento para 300mm 15 mm.

3.3.9. Análisis de Independencia de Malla

Al refinar la malla, el tamaño de los elementos se reduce y la solución es más exacta, sin embargo el costo computacional también aumenta; por eso, se realiza un análisis de independencia de malla, en el cual se compara el cambio del valor de una propiedad del sistema respecto a la modificación del número de elementos de la malla, y el criterio para seleccionar el número de elementos se define como un cambio menor a una tolerancia entre dos números de elementos distintos. En este caso, el criterio es una variación menor al 5 %. Se proponen 3 cantidades de elementos, que se presentan a continuación en la Tabla 3.12:

Se escoge una celda de la malla, que esté en las coordenadas (0.4985,0.0025,0) que corresponde a un punto aguas abajo de la ubicación donde está el disco de ruptura, y se registra el cambio de la velocidad en el tiempo. Los resultados obtenidos de las distintas mallas se muestran en la figura 3.10 a continuación:

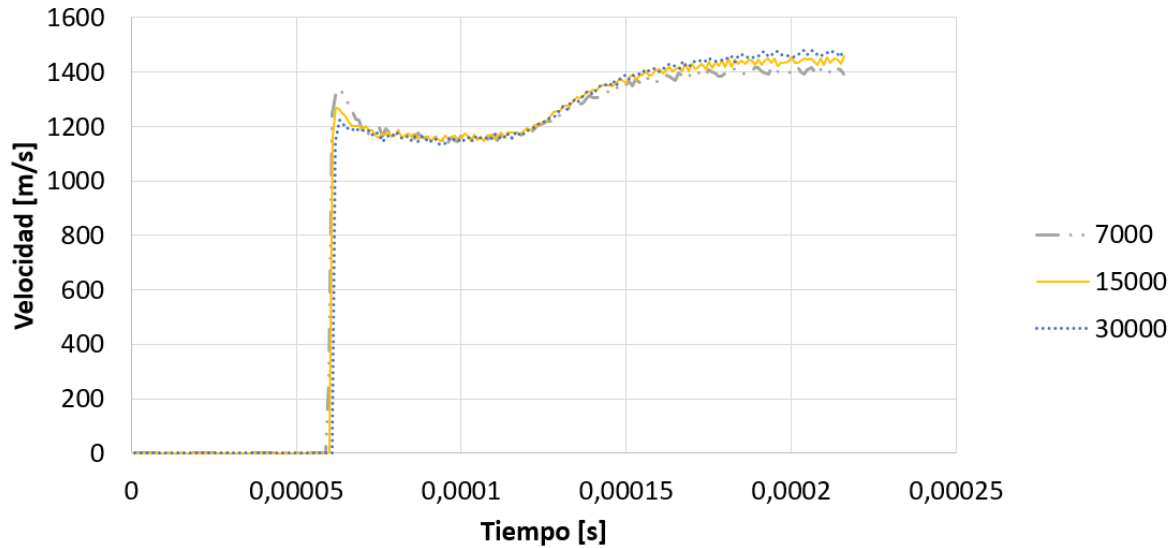


Figura 3.10: Análisis de independencia de malla en el punto (0.4985,0.0025,0) laminar. Fuente: Autor

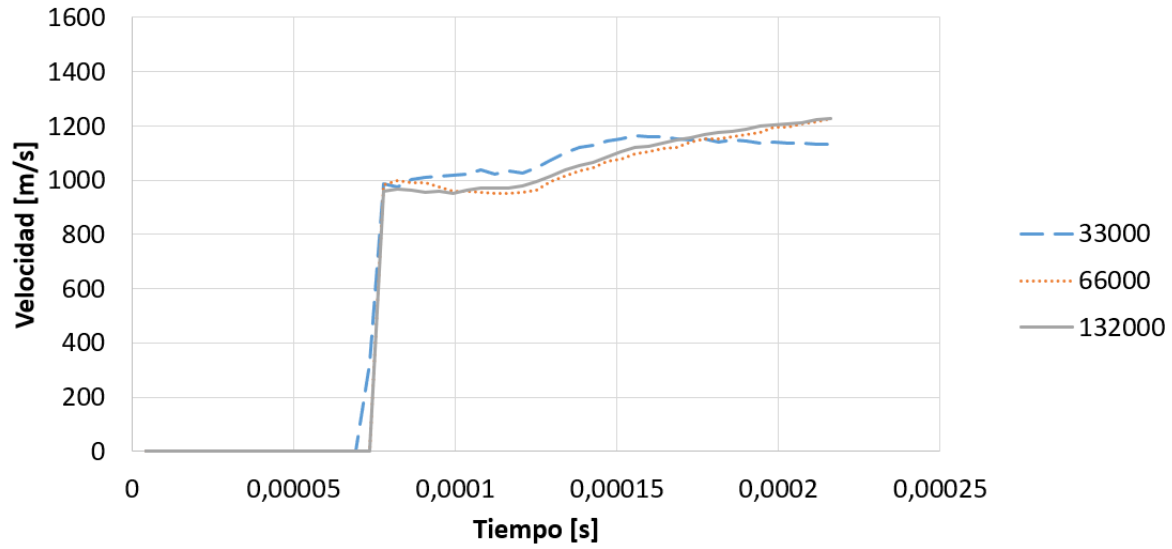


Figura 3.11: Análisis de independencia de malla en el punto (0.4985,0.0025,0) turbulento.
Fuente: Autor

La variación de los resultados entre los 15064 y los 30480 elementos es menor al 5 %, por lo que se decide usar la malla de 15064 elementos, que contiene un espaciado mínimo de 0.34 mm para realizar las simulaciones.

Al ser un fenómeno transitorio, se realiza un análisis similar al de número de elementos, con el paso temporal, para hallar un paso temporal apropiado que aumente la exactitud sin incurrir en costos computacionales innecesarios. Se proponen 3 pasos temporales, 6.8×10^{-8} , 3.4×10^{-8} y 1.2×10^{-8} , para los cuales se evalúa la temperatura máxima en 5 puntos del sistema a 23.5mm, 70.5mm, 117.5mm, 164.5mm y 211.5mm del disco de ruptura. En la figura 3.12 se observan los resultados de este análisis.

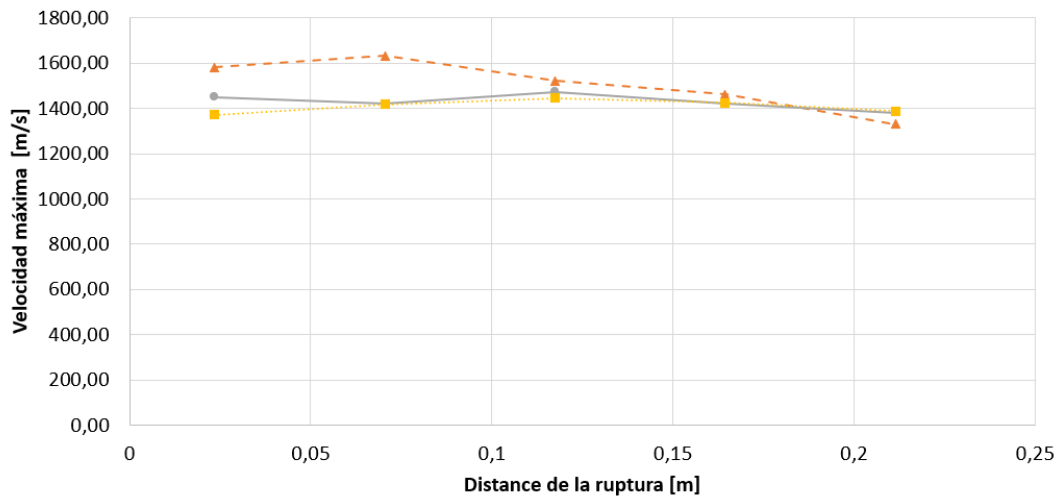


Figura 3.12: Análisis de paso temporal máxima velocidad a distintas distancias del disco de ruptura caso laminar. Fuente: Autor

De estos dos análisis se decide usar el espaciado de 0.34mm y el paso temporal 3.4×10^{-8} para

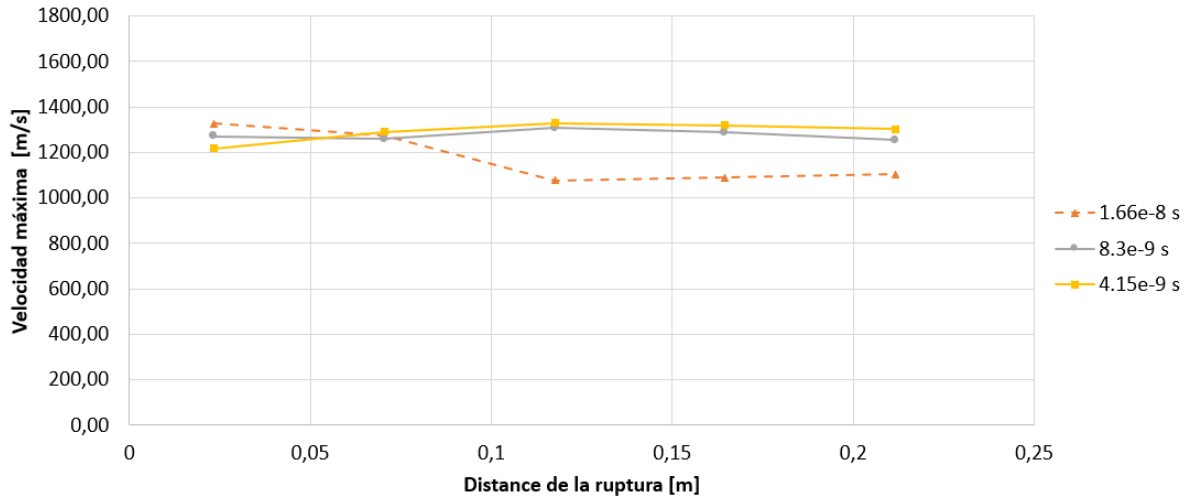


Figura 3.13: Análisis de paso temporal máxima velocidad a distintas distancias del disco de ruptura caso turbulento. Fuente: Autor

todas las simulaciones. En el caso de que la geometría sea más grande el número de elementos se ajusta cumpliendo estrictamente con el espaciado.

Con eso se determinan el número de elementos que tendrá cada malla que se muestra a continuación en las Tabla 3.14 para la aproximación laminar y en la Tabla 3.15 para la aproximación turbulenta:

Longitud (m)	Número de elementos D=10mm	Número de elementos D=15mm
0.3	15204	25938
0.7	31668	51766
1.2	52262	84106
1.7	72828	116468
2.2	93408	148874
3.0	126378	200596

Tabla 3.14: Número de elementos de las mallas para distintas condiciones geométricas de longitud y diámetro para el caso laminar

El criterio para determinar la ocurrencia de la autoignición en las simulaciones, es que la temperatura aumente hasta valores cercanos y superiores a 2318 K, que es la temperatura de llama adiabática de la combustión de hidrógeno en aire [30], además de un aumento en la fracción másica de las especies que son productos de la reacción, principalmente fracción másica de H_2O superior al 20 %.

A una determinada configuración geométrica, la simulación se inicia con el valor aproximado al entero más cercano de presión umbral de autoignición en MPa, hallada de forma experimental para esas condiciones. Si ocurre la autoignición se realizan simulaciones disminuyendo la presión inicial en intervalos de 1MPa hasta que la autoignición deje de ocurrir. Si en el momento inicial no ocurre autoignición, se realiza el procedimiento opuesto, se realizan incrementos de la presión inicial de la simulación en intervalos de 1MPa hasta que ocurra la autoignición.

Longitud (m)	Número de elementos D=10mm	Número de elementos D=15mm
0.3	66729	80598
0.7	129051	147756
1.2	207090	231798
1.7	285051	315756
2.2	363051	399756
3.0	487851	534198

Tabla 3.15: Número de elementos de las mallas para distintas condiciones geométricas de longitud y diámetro para el caso turbulento

Los puntos a los que ocurre y a los que no ocurre la autoignición son reportados y se traza una línea de tendencia para observar si están dentro de la consideración experimental. El procedimiento es repetido para todas las variaciones de longitud (0.3m, 0.7m, 1.2m, 1.7m, 2.2m, 3.0m) y todas las variaciones de diámetros (10mm y 15mm).

Para determinar la velocidad promedio de la onda de choque, se establecen distintos puntos a lo largo de la tubería, y se observa el tiempo de llegada de la onda de choque, la velocidad es determinada con la relación entre la diferencia de coordenadas de los puntos, que sería la distancia, y la diferencia de los tiempos de llegada de la onda de choque.

4. Resultados y análisis de resultados

En este capítulo se presentan los resultados de las simulaciones realizadas del caso de estudio, bajo las suposiciones y configuraciones establecidas en el capítulo 3. Por medio de figuras se analizan los comportamientos de los fenómenos de interés, según los cambios de las variables observadas, posteriormente con el uso de curvas de presiones umbrales se realiza la verificación de los datos de la simulación respecto a los reportados en la literatura consultada del caso de estudio. Adicionalmente, a partir de la información obtenida se realizan sugerencias de estrategias para el almacenamiento de hidrógeno comprimido con el fin de disminuir la posibilidad de ocurrencia de autoignición procurando evitar la disminución de la presión de almacenamiento.

4.1. Tiempo de simulación

Se realizaron simulaciones laminares para todos los casos de la variación de la presión umbral respecto al diámetro y longitud, y sólo se realizaron simulaciones turbulentas para los casos de 10mm y 15mm de diámetro con 0.3m de largo. El tiempo total de simulación en el servidor de Koyeb fue 134.45 horas, sin contar el tiempo de funcionamiento requerido para la descarga de los archivos con los resultados para el posprocesamiento; esto según las tarifas de servicio al momento de la redacción de este documento, equivale a 123 dólares. En las Tablas 4.16 y 4.17 se presentan la cantidad de horas para cada simulación realizada, en los casos laminares.

Longitud	Número simulaciones	Tiempo por simulación (horas)	Tiempo total (horas)
0.3	3	0.09	0.28
0.7	4	0.53	2.12
1.2	4	1.56	6.22
1.7	2	3.11	6.22
2.2	3	5.22	15.65
3.0	3	9.69	29.06

Tabla 4.16: Horas de simulación para los casos laminares de 10mm

Longitud	Número simulaciones	Tiempo por simulación (horas)	Tiempo total (horas)
0.3	2	0.14	0.28
0.7	3	0.75	2.26
1.2	3	2.18	6.55
1.7	2	4.34	8.68
2.2	3	7.25	21.74
3.0	2	13.41	26.81

Tabla 4.17: Horas de simulación para los casos laminares de 15mm

Asumiendo que aumentar los elementos de la malla incrementa el tiempo de simulación de manera lineal, que simular más tiempo del fenómeno también tiene el mismo efecto; y que la

cantidad de simulaciones es la misma, y no mayor, se estimaron los tiempos que demoraría la simulación de los casos turbulentos. Tomando como tiempo inicial las simulaciones turbulentas que sí se realizaron. En las Tablas 4.18 y 4.19 se encuentran subrayados los valores de tiempo de simulación estimados para la simulación turbulenta de los casos, y sin subrayar, los valores obtenidos al simular dos de los casos turbulentos.

Longitud	Número simulaciones	Tiempo por simulación (horas)	Tiempo total (horas)
0.3	3	1.29	3.86
0.7	<u>4</u>	<u>6.72</u>	<u>26.89</u>
1.2	<u>4</u>	<u>19.21</u>	<u>76.83</u>
1.7	<u>2</u>	<u>37.95</u>	<u>75.89</u>
2.2	<u>3</u>	<u>63.15</u>	<u>189.46</u>
3.0	<u>3</u>	<u>116.48</u>	<u>349.44</u>

Tabla 4.18: Horas de simulación para los casos turbulentos de 10mm

Longitud	Número simulaciones	Tiempo por simulación (horas)	Tiempo total (horas)
0.3	3	1.57	3.15
0.7	<u>3</u>	<u>7.80</u>	<u>23.40</u>
1.2	<u>3</u>	<u>21.79</u>	<u>65.36</u>
1.7	<u>2</u>	<u>42.59</u>	<u>85.19</u>
2.2	<u>3</u>	<u>70.46</u>	<u>211.39</u>
3.0	<u>2</u>	<u>129.24</u>	<u>258.48</u>

Tabla 4.19: Horas de simulación para los casos turbulentos de 15mm

El aumento significativo del tiempo de simulación para el caso turbulento respecto al caso laminar, se debe a que se requiere de mayor número de elementos por el refinamiento cerca de las paredes del sistema, uso de pasos temporales menores para disminuir el número Courant y aumentar la exactitud de los resultados, además de la inclusión de ecuaciones de gobierno para la simulación URANS (Unsteady Reynolds Average Navier Stokes), y términos fuente adicionales en las ecuaciones de energía de las especies por el uso del modelo de combustión EDC (Eddy Dissipation Concept).

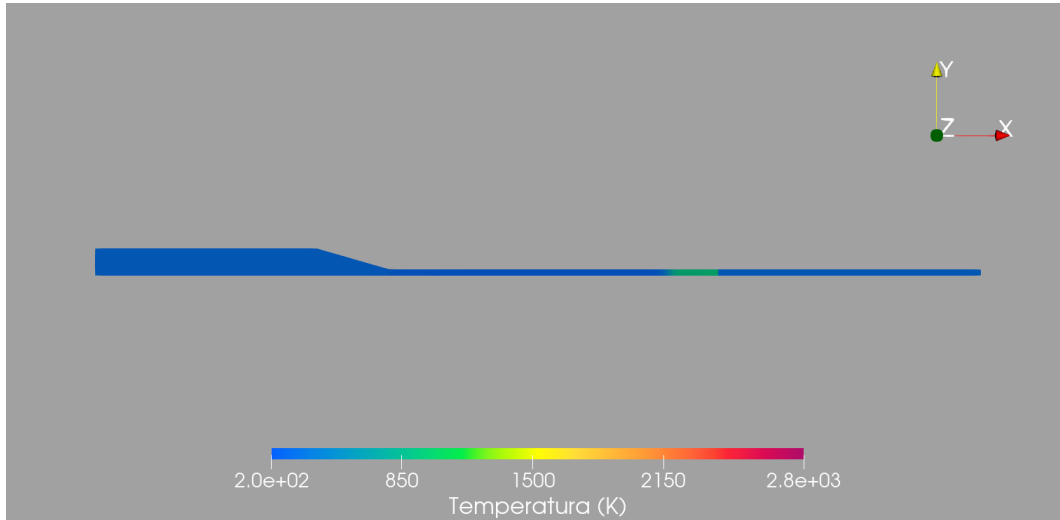
Se puede observar según la estimación presentada en las Tablas anteriores, que simular todos los casos en flujo turbulento hubiera requerido de 1318.6 horas, equivalente a un costo de 1215 dólares. Sin tener en cuenta el tiempo adicional requerido de uso del servidor para la descarga de los terabytes de archivos necesaria para el análisis de los resultados. Es decir 10 veces más tiempo y dinero serían requeridos para la realización de las simulaciones turbulentas. Lo que representa un costo demasiado alto para el presupuesto planteado inicialmente, y demuestra las limitaciones computacionales para poder realizar dicho análisis del fenómeno de autoignición.

4.2. Resultados numéricos

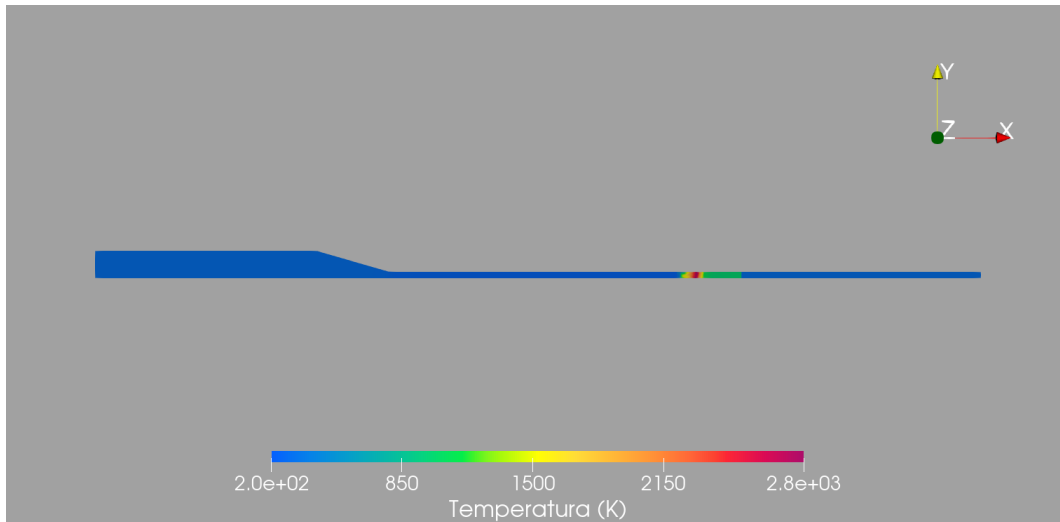
En esta sección se analizan los resultados numéricos obtenidos en las simulaciones realizadas. Primero se expone cómo se observó la autoignición en los perfiles de las propiedades observadas, y se compara con perfiles para casos en los que no ocurrió autoignición. Por último, se revisa el cambio de la presión umbral respecto a la manipulación de las condiciones geométricas, y las diferencias entre las suposiciones de régimen laminar y régimen turbulento.

4.2.1. Ocurrencia de la autoignición

Como se mencionó en el capítulo 3, la autoignición en la simulación es identificada por el aumento de temperatura por encima de 2318K, y la presencia de fracción másica de agua mayor a 20 %. En las figuras 4.14a y 4.14b se presentan los perfiles de temperatura en el dominio, transcurridos 0.3 ms desde la ruptura para el caso de 0.7m de longitud y 15mm de diámetro, a presiones de 3 MPa y 4MPa respectivamente.



(a) P=3MPa



(b) P=4MPa

Figura 4.14: Distribución de temperatura a 0.3 ms de la ruptura para el caso laminar. Fuente: Autor

En la figura 4.14a se puede observar una región del dominio con una alta temperatura, mayor a 850K, la cual corresponde a los gases calentados por el paso de la onda de choque, no obstante, no hay presencia de combustión, y no ocurre la autoignición. Se requiere de aumentar la presión para que la autoignición ocurra.

En la figura 4.14b se observa que en una sección del dominio la temperatura supera los 2600K,

debido a que se libera una cantidad de energía adicional que no corresponde a la onda de choque, esto es debido a que ocurre combustión, es decir, para este caso con 4MPa al momento de la ruptura sí ocurre la autoignición.

Los perfiles obtenidos corresponden a la teoría mencionada en la literatura, donde la autoignición ocurre en la zona de mezclado aguas arriba de la onda de choque, y se puede observar que la región de temperaturas mayores a 2600K correspondiente a la autoignición se encuentra detrás de la onda de choque, que está en el salto abrupto de temperaturas entre 300K y más de 850K, apareciendo como el color verde en la figura mencionada.

En los estudios de combustión es común analizar el avance de las reacciones con la medición de concentraciones de radicales libres, como el radical OH ; ya que experimentalmente su concentración se puede estimar por su quimioluminiscencia; no obstante, para efectos de evaluar el avance de la simulación se utilizará la fracción másica de H_2O , que sería el producto final de la reacción de un solo paso de la combustión del hidrógeno en aire, teniendo en cuenta que la cinética escogida, no considera la formación de óxidos nitrosos debido a que no son relevantes bajo el planteamiento y las suposiciones de este trabajo, y que la concentración de H_2O es mayor respecto a la fracción másica de los intermediarios producidos.

En la figura 4.15a se muestra la distribución de la fracción másica de H_2O en el dominio, para la presión de 3MPa, en el código de colores utilizado, es notorio que la fracción tiende a cero, y como esta sustancia sólo se produce en la combustión, indica que no ha ocurrido autoignición.

En la figura 4.15b que corresponde a 4MPa, se observa que la fracción másica de H_2O alcanza 0.32, o 32 % de agua, esto indica que sí ocurre autoignición, y la combustión produce esa cantidad de agua.

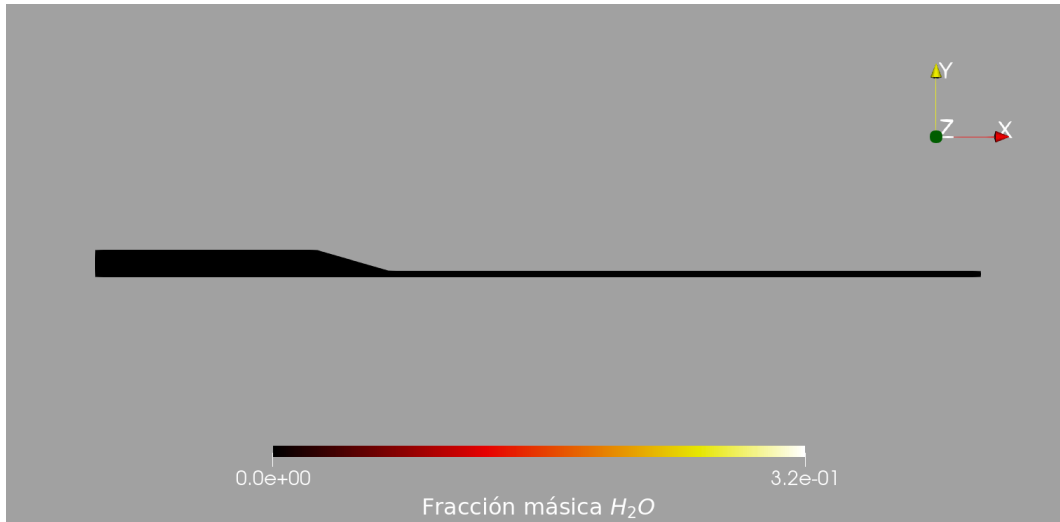
4.2.2. Comparación de los resultados numéricos

Los resultados del estudio numérico sobre el efecto de la variación del diámetro y la longitud de la tubería son mostrados en la figura 4.16. Se observa que bajo la suposición de flujo laminar, la presión umbral es independiente del cambio de diámetro y sólo varía con los cambios de longitud, esto se evidencia con la superposición de los datos en la gráfica. Para las dos simulaciones de flujo turbulento se observa que el diámetro sí afecta la presión umbral de autoignición, los puntos no se superponen, hay una presión umbral distinta para cada diámetro. Además, la presión umbral es mayor para la suposición de flujo turbulento que laminar, esto podría deberse a que la onda de choque en el flujo turbulento disipa más energía y es más débil.

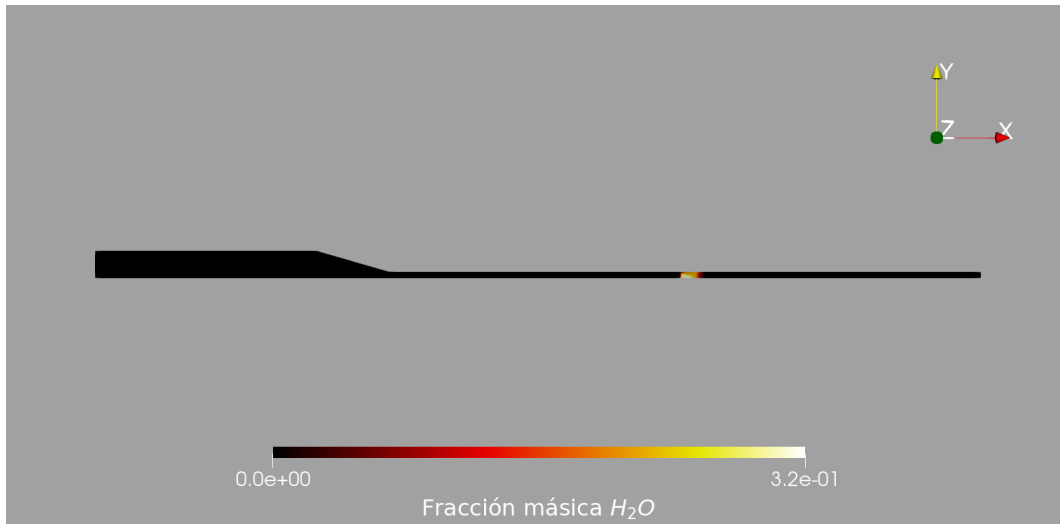
El aumento de longitud disminuye la presión umbral hasta 1.2m de longitud, donde se alcanza un mínimo, y posteriormente el comportamiento se invierte, los aumentos de longitud de tubería aumentan la presión umbral hasta el estancamiento en 4 MPa. El aumento de diámetro de tubería disminuye la presión umbral de autoignición, y los motivos se mencionan en la verificación de la simulación.

4.3. Verificación de la simulación

En esta sección se comparan los datos obtenidos en las simulaciones con los datos reportados en la literatura del caso de estudio, se analiza qué diferencias porcentuales hay, y las posibles razones



(a) $P=3\text{MPa}$



(b) $P=4\text{MPa}$

Figura 4.15: Fracción másica de H_2O a 0.3 ms de la ruptura. Fuente: Autor

de esas diferencias.

4.3.1. Presión umbral para distintas variaciones geométricas

En la presente sección se realiza una verificación de los datos obtenidos en la simulación con los datos reportados en la literatura del caso de estudio seleccionado. En la figura 4.17 se comparan los resultados obtenidos de la simulación con suposición de flujo laminar de la presión umbral respecto a los cambios de longitud de tubería para 10mm de diámetro. Y se compara con un punto de la simulación realizada con la suposición de flujo turbulento.

Se observa que la suposición de flujo laminar subestima la presión umbral de autoignición, y puede deberse a que la onda de choque es más fuerte bajo esta simplificación, que implica un flujo ordenado, mientras que la simulación turbulenta implica mayor disipación de la energía de la onda de choque, lo que la hace más débil.

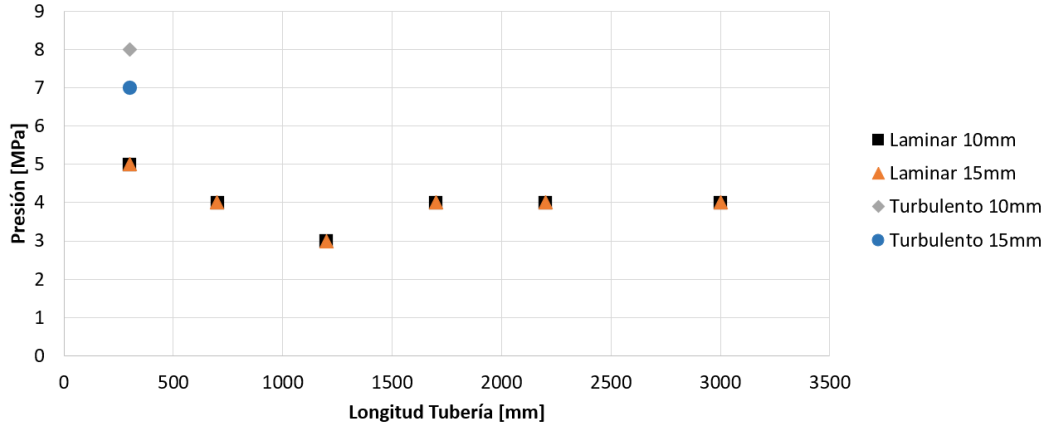


Figura 4.16: Comparación presión umbral simulaciones a distintas geometrías. Fuente: Autor

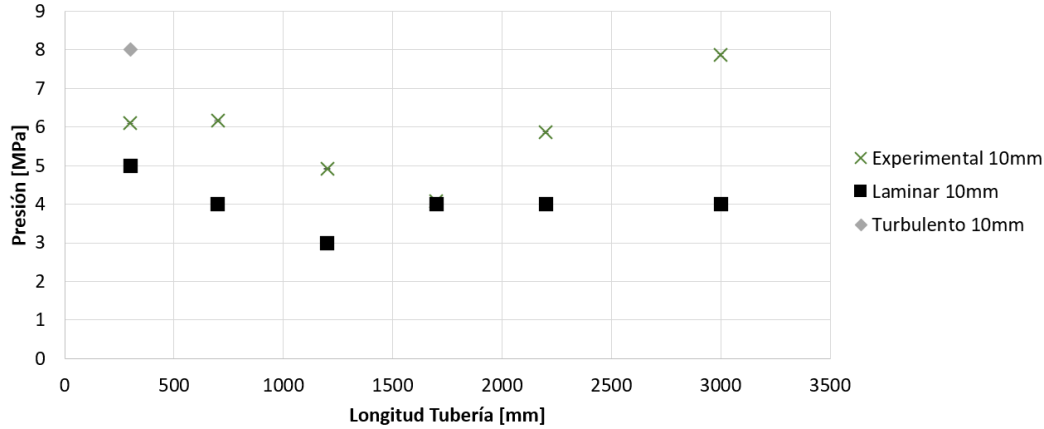


Figura 4.17: Verificación 10mm. Fuente: Autor

La suposición de flujo turbulento sobreestima presión de autoignición, es importante tener en cuenta que a medida que la presión aumenta, la distancia desde la ruptura hasta el punto de ignición es menor [19]. Las sobreestimaciones de la simulación pueden deberse a que se tuvo en cuenta la ignición al interior de la tubería, pero no se evaluó la autoignición que ocurre al salir el chorro de la tubería, que es lo que está reportado en los resultados reportados en la literatura sobre el caso de estudio, y son presiones menores que las requeridas para la autoignición al interior de la tubería.

Se observa que el comportamiento se desvía considerablemente de los datos reportados en la literatura, subestimando la presión de autoignición, y representando un desfase entre 1 y 4 MPa en el valor mínimo de presión umbral de autoignición. Que en la simulación ocurre cuando la longitud es 1.2 m, y en los datos reportados en la literatura el mínimo ocurre a 1.7 m de longitud. En la Tabla 4.20 se muestran las diferencias porcentuales de la verificación a 10mm de diámetro.

Para el diámetro de 15mm, los datos obtenidos por la simulación representan un comportamiento similar a los datos reportados en la literatura, con diferencias considerables, en todo el intervalo subestimando la presión de autoignición, y para este caso la presión umbral mínima ocurre a la misma longitud de la tubería, 1.2 m. Las diferencias porcentuales de los datos obtenidos en la

Presión umbral simulación (MPa)	Presión umbral experimental (MPa)	Diferencia %
5.00	6.11	18.17
4.00	6.16	35.06
3.00	4.92	39.02
4.00	4.07	1.72
4.00	5.86	31.74
4.00	7.87	49.17

Tabla 4.20: Diferencia porcentual para la verificación de las simulaciones en el caso laminar de 15mm

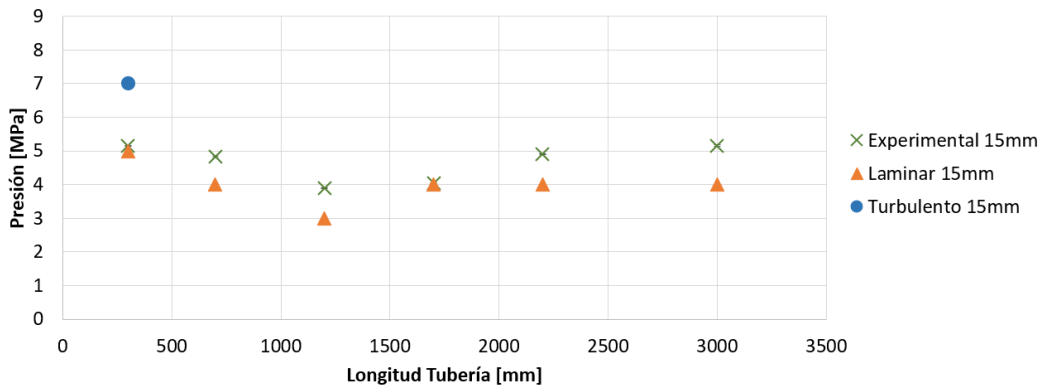


Figura 4.18: Verificación 15mm. Fuente: Autor

simulación y los datos reportados en la literatura para el caso de 15mm de diámetro, se presentan en la Tabla 4.21:

Presión umbral simulación (MPa)	Presión umbral experimental (MPa)	Diferencia %
5.00	5.15	2.91
4.00	4.82	17.01
3.00	3.89	22.88
4.00	4.04	0.99
4.00	4.9	18.37
4.00	5.16	22.48

Tabla 4.21: Diferencia porcentual para la verificación de las simulaciones en el caso laminar de 15mm

Respecto al comportamiento del fenómeno, el efecto de la capa límite viscosa en la disipación de la energía de la onda de choque es menor a medida que se aumenta el diámetro de la tubería, es por eso que en los datos reportados en la literatura, aumentar el diámetro disminuye la presión umbral de autoignición [38].

4.3.2. Velocidad promedio de la onda de choque

Sobre la velocidad promedio de la onda de choque respecto a la distancia, se observa que con las simulaciones laminares sobreestiman la velocidad, lo que concuerda con lo discutido anteriormente, se puede observar una aceleración más rápida o más lenta. Simulación 0.7 m, 6 MPa, comparación con datos reportados en la literatura de la velocidad promedio de la onda de choque.

Luego se comparan los flujos de los dos casos, para determinar cómo la variación de geometría influye en la velocidad promedio de la onda de choque. Un efecto importante que no se tiene en cuenta en la simulación, es la ruptura no ideal del disco.

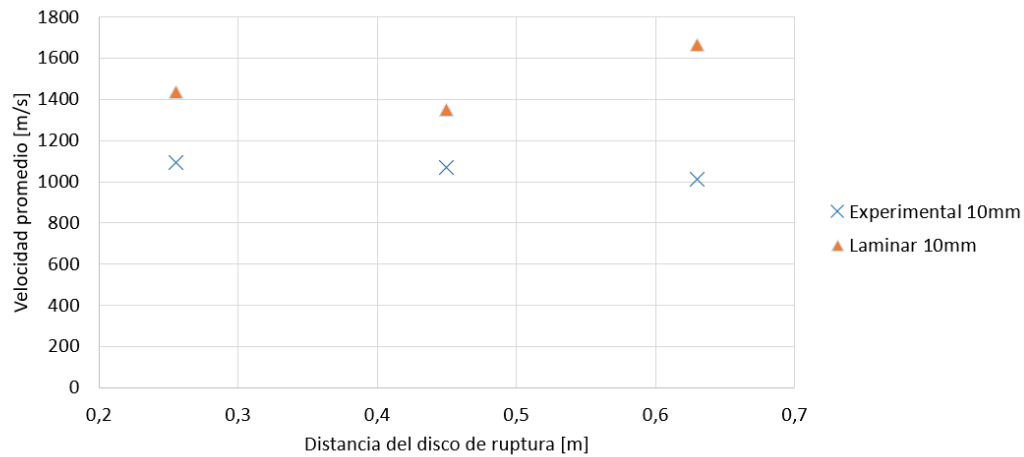


Figura 4.19: Velocidad promedio de la onda de choque 10mm. Fuente: Autor

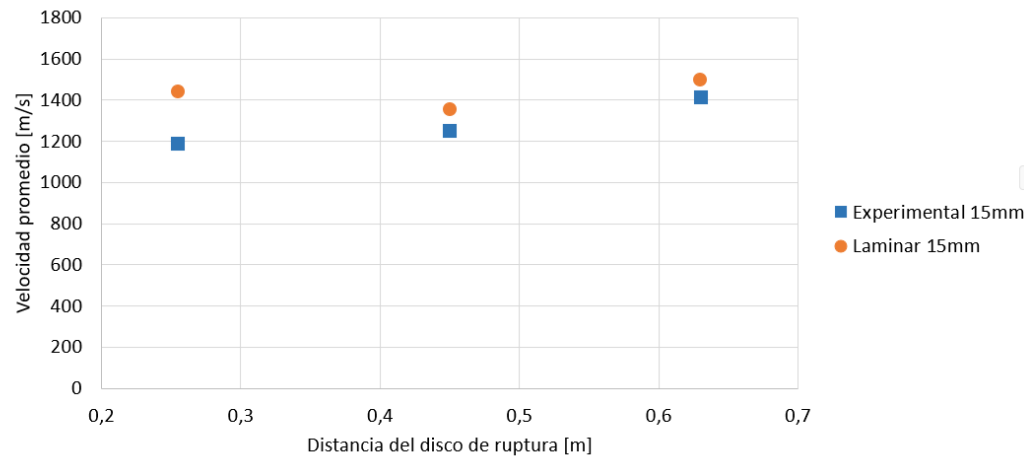


Figura 4.20: Velocidad promedio de la onda de choque 15mm. Fuente: Autor

Para las velocidades promedio de la onda de choque se observa una tendencia similar a la de las presiones umbrales. Los datos de la simulación se acercan más a los datos reportados en la literatura a mayor diámetro 15 mm. La diferencia mínima es del 6 % y la máxima 21 % para el caso de 15mm; la diferencia mínima es 26 % y la máxima 64 % para el caso de 10mm.

4.4. Estrategias de almacenamiento

Como se mencionó anteriormente, los resultados de las simulaciones realizadas difieren en alto porcentaje respecto a los datos reportados en la literatura, principalmente debido a la simplificación de flujo laminar y al dominio seleccionado que no incluye la llama del chorro de salida. Por este motivo, sólo se pueden realizar recomendaciones con base en el análisis cualitativo de los resultados, y con la información encontrada en la literatura relacionada a simulaciones y el fenómeno de autoignición del hidrógeno comprimido.

Disminuir la presión de almacenamiento reduce la posibilidad de ocurrencia de autoignición, no obstante, como se quiere almacenar el hidrógeno a la mayor densidad posible, no es una medida factible en todos los casos. Otras secciones en las que se puede reducir la probabilidad de autoignición es en los accesorios y conexiones de los sistemas, como las válvulas de alivio, de venteo o de ruptura. Para disminuir los tiempos de recarga para los casos de transporte, se favorece una mayor tasa de flujo de hidrógeno y mayor gradiente de presión, características que promueven la ocurrencia de autoignición. Como se observó en los resultados de la sección anterior, tramos de tuberías más largas aumentan la presión umbral de autoignición, así como la disipación de la onda de choque, que puede realizarse con variaciones geométricas en los accesorios, o en la descarga a la atmósfera empleando difusores para el chorro es liberado.

La simulación CFD con el software OpenFOAM y las suposiciones establecidas sí demostró la ocurrencia de ignición espontánea por difusión, a partir de condiciones iniciales de alta presión y temperatura ambiente; sin ningún punto de ignición forzado como lo sería una zona con temperatura inicial superior a la de ignición del hidrógeno. Sin embargo, presentó diferencias considerables respecto al efecto de la variación geométrica en la presión umbral.

En caso de validar la simulación, esta herramienta de código abierto podría usarse para reducir el esfuerzo experimental en estudios de diseño de plantas, estimando áreas afectadas, radiación térmica liberada, sonido, y ondas de choque ante posibles situaciones de fuga por fallos en el sistema de almacenamiento, así logrando estimar espaciados entre los tanques de alta presión, para no recurrir solamente a heurísticas.

Con la simulación puede observarse el comportamiento al cambiar otras condiciones, como los materiales, rugosidad de las paredes internas, respuesta de sistemas de control, concentraciones de las especies y estimar tiempos de mantenimiento.

5. Conclusiones

- En este trabajo se realizó la simulación de un escenario de autoignición de hidrógeno a almacenado a alta presión con el uso de la herramienta computacional de código abierto OpenFOAM Foundation v11. Por limitaciones computacionales, la mayoría del análisis fue realizado con la suposición de flujo laminar, que fue la principal causa de la alta diferencia respecto a los resultados reportados en la literatura sobre el caso de estudio. Los resultados obtenidos representan cualitativamente el fenómeno. Se observó que la disipación de energía de la onda de choque es un fenómeno importante en la ocurrencia de la autoignición, y que el cambio de geometría puede incentivar o disminuir las posibilidades de la ocurrencia de la autoignición. Las diferencias porcentuales varían desde el 1 % hasta el 50 % según la condición geométrica simulada.
- Se seleccionó el caso de estudio ("Experiment study on the pressure and flame characteristics induced by high-pressure hydrogen spontaneous ignition", en español .^{Estudio experimental sobre las características de presión y llama inducidas por la ignición espontánea de hidrógeno a alta presión}) para ser simulado, por medio de una matriz de decisión realizada con promedios ponderados entre 0 y 1 para las distintas opciones revisadas en la literatura. Las consideraciones fueron disponibilidad de los datos reportados en el trabajo, claridad del montaje experimental, variables independientes, variables dependientes, y la actualidad del trabajo.
- Se demostró que el software de uso libre OpenFOAM v11 puede representar la ocurrencia de combustión espontánea por difusión sin especificar de manera forzada un punto de ignición. No obstante, las diferencias de la presión a la que ocurre la autoignición alcanzan el 50 %, por lo que se deben verificar los resultados para todos los puntos de la suposición turbulenta antes de realizar análisis de otros casos de estudio.
- Se sugirieron estrategias para implementar en los sistemas de almacenamiento de hidrógeno comprimido, para analizar los casos con el uso de simulaciones CFD, para complementar diseños, estimaciones de sistemas de control entre otros. Sin realizar una guía de seguridad de almacenamiento, ya que no está dentro del alcance del trabajo. Estas estrategias podrían ser analizadas en el contexto del creciente número de proyectos que involucran el uso y almacenamiento del hidrógeno, y no se limitaría a sitios estáticos como plantas de producción, sino que podría aplicarse al transporte y uso en vehículos o dispositivos en movimiento.

6. Recomendaciones y futuros trabajos

6.1. Recomendaciones

- Mejorar la estabilidad de conexión a internet en la Escuela de Ingeniería Química, para disminuir la intermitencia al utilizar de manera remota los recursos computacionales disponibles, para simulaciones CFD.
- Observar cuidadosamente las sugerencias de operación en almacenamiento de hidrógeno comprimido como criterios a tener en cuenta para disminuir la posibilidad de ocurrencia de autoignición, no como una guía de seguridad para el almacenamiento o diseño de sistemas de almacenamiento de hidrógeno comprimido.

6.2. Trabajos futuros

- Simular escenarios distintos a tuberías, que involucren geometrías complejas.
- Evaluar numéricamente utilizando modelos de radiación, para estimar los efectos en espacios cercanos ante posibles accidentes.
- Modificar el solver de OpenFOAM para realizar simulaciones implementando mecanismos de cinética de combustión de hidrógeno reducidos, en los que la energía de activación es variable.
- Realizar simulaciones como iteraciones en la optimización del diseño de sistemas de almacenamiento de hidrógeno comprimido.

Referencias

- [1] Hao Li et al. “Safety of hydrogen storage and transportation: An overview on mechanisms, techniques, and challenges”. En: *Energy Reports* 8 (nov. de 2022), págs. 6258-6269. ISSN: 23524847. DOI: 10.1016/j.egy.2022.04.067.
- [2] Nasiru S. Muhammed et al. “Hydrogen production, transportation, utilization, and storage: Recent advances towards sustainable energy”. En: *Journal of Energy Storage* 73 (dic. de 2023), pág. 109207. ISSN: 2352152X. DOI: 10.1016/j.est.2023.109207.
- [3] Andrew Chapman et al. “Societal penetration of hydrogen into the future energy system: Impacts of policy, technology and carbon targets”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (7 feb. de 2020), págs. 3883-3898. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.12.112.
- [4] Elham Abohamzeh et al. “Review of hydrogen safety during storage, transmission, and applications processes”. En: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 72 (sep. de 2021), pág. 104569. ISSN: 09504230. DOI: 10.1016/j.jlp.2021.104569.
- [5] Ministerio de Minas y Energía. *Hoja de ruta del hidrógeno en Colombia*. 2022. URL: https://www.minenergia.gov.co/documents/5861/Hoja_Ruta_Hidrogeno_Colombia_2810.pdf.
- [6] Dan Tang et al. “State-of-the-art hydrogen generation techniques and storage methods: A critical review”. En: *Journal of Energy Storage* 64 (ago. de 2023), pág. 107196. ISSN: 2352152X. DOI: 10.1016/j.est.2023.107196.
- [7] Liejin Guo et al. “Hydrogen safety: An obstacle that must be overcome on the road towards future hydrogen economy”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 51 (ene. de 2024), págs. 1055-1078. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2023.08.248.
- [8] Xiaodan Xu et al. “Spontaneous ignition of high-pressure hydrogen and boundary layer characteristics in tubes”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (39 ago. de 2020), págs. 20515-20524. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2020.02.060.
- [9] G ASTBURY y S HAWKSWORTH. “Spontaneous ignition of hydrogen leaks: A review of postulated mechanisms”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 32 (13 sep. de 2007), págs. 2178-2185. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2007.04.005.
- [10] Fuyuan Yang et al. “Review on hydrogen safety issues: Incident statistics, hydrogen diffusion, and detonation process”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 46 (61 sep. de 2021), págs. 31467-31488. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2021.07.005.
- [11] P Wolanski. “Investigation into the mechanism of the diffusion ignition of a combustible gas flowing into an oxidizing atmosphere”. En: *Fourteenth Symposium (International) on Combustion, 1973*. 1973.

- [12] Jacques Chaineaux y Guy Mavrothalassitis. “Discharge in air of a vessel pressurized by a flammable gas; volume of the resulting flammable mixture generated”. En: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 3.1 (1990), págs. 88-90. ISSN: 0950-4230. DOI: [https://doi.org/10.1016/0950-4230\(90\)85030-D](https://doi.org/10.1016/0950-4230(90)85030-D). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/095042309085030D>.
- [13] B.L. Wang y W. Reng. *Hydrogen-oxygen flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in three-dimensional rectangular channels with no-slip walls*. 2001.
- [14] Y. Liu et al. “Numerical simulation on hydrogen fuel jetting from high pressure tank”. En: *Sci. Tech. Energetic Materials* 67 (dic. de 2005), págs. 229-8510.
- [15] F.L. Dryer et al. “Spontaneous Ignition of Pressurized Releases of Hydrogen and Natural Gas into Air”. En: *Combust. Sci. and Tech* 179 (ene. de 2006), págs. 663-694. ISSN: 00102202. DOI: 10.1080/00102200600713583.
- [16] Liang Gong et al. “Numerical study on the mechanism of spontaneous ignition of high-pressure hydrogen during its sudden release into a tube”. En: *Safety Science* 129 (2020), pág. 104807. ISSN: 0925-7535. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ssci.2020.104807>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925753520302046>.
- [17] Seung-Won Cha, Tae-Seong Roh y Hyoung Jin Lee. “Effect of opening area on the suppression of self-ignition of high-pressure hydrogen gas leaking in the air by an extension tube”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 46.7 (2021), págs. 5904-5915. ISSN: 0360-3199. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.11.132>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S036031992034338X>.
- [18] Xiaofang Zhuo y Xiaolong Gou. “Kinetic Analysis on Spontaneous Combustion of Pressurized Hydrogen in Tubes”. En: *ACS Omega* 6.40 (2021), págs. 26509-26518. DOI: 10.1021/acsomega.1c03761.
- [19] Mengyuan Zhu et al. “Numerical simulation on the spontaneous ignition of high-pressure hydrogen release through a tube at different burst pressures”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 47.18 (2022), págs. 10431-10440. ISSN: 0360-3199. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.01.081>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319922001689>.
- [20] Xigui Li et al. “Numerical simulation of the effect of multiple obstacles inside the tube on the spontaneous ignition of high-pressure hydrogen release”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 47.77 (2022), págs. 33135-33152. ISSN: 0360-3199. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.07.202>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319922032529>.
- [21] Makoto Asahara et al. “Influence of tube cross-section geometry on high-pressure hydrogen-flow-induced self-ignition”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 48.21 (2023), págs. 7909-7926. ISSN: 0360-3199. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.08.210>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319922038204>.
- [22] Yiming Jiang et al. “Physics of flame evolution following spontaneously combusting hydrogen emerging from a tube into the unconfined space”. En: *Combustion and Flame* 251 (2023), pág. 112683. ISSN: 0010-2180. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2023.112683>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218023000688>.

- [23] Salvatore Iavarone, Savvas Gkantonas y Epaminondas Mastorakos. “Stochastic low-order modelling of hydrogen autoignition in a turbulent non-premixed flow”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 39 (4 2023), págs. 5199-5208. ISSN: 15407489. DOI: 10.1016/j.proci.2022.07.129.
- [24] Shaodong Sun et al. “Numerical study on the influence mechanism of different types of burst disc on high pressure hydrogen spontaneous combustion in tube”. En: *Journal of Energy Storage* 67 (2023), pág. 107626. ISSN: 2352-152X. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.107626>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X2301023X>.
- [25] Chen Lu et al. “Numerical study on the effects of rupture disk opening manner on high-pressure hydrogen release and spontaneous ignition”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* (2023). ISSN: 0360-3199. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.11.332>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319923061712>.
- [26] Gan Cui et al. “Study on the characteristics and predictive model of autoignition induced by shock wave from high-pressure hydrogen leakage”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 79 (ago. de 2024), págs. 1165-1179. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.07.123.
- [27] Fondo de Energías No Convencionales y Gestión Eficiente de la Energía [FENOGE]. *Proyectos de Hidrógeno en Colombia*. URL: https://fenoge.gov.co/documentos-pdf/proyectos/Proyectos_Colombia_Hidrogeno3.pdf.
- [28] Milo D. Koretsky. *Engineering and Chemical Thermodynamics*. 2th. John Wiley & Sons Ltd, 2013.
- [29] Yunus A. Çengel y Michael A. Boles. *Thermodynamics: An Engineering Approach*. 5th. McGraw-Hill, 2005.
- [30] R. D. McCarty, J. Hord y H. M. Roder. *Selected properties of hydrogen (Engineering Design Data)*. Inf. téc. Feb. de 1981.
- [31] Gan Cui et al. “The Progress of Autoignition of High-Pressure Hydrogen Gas Leakage: A Comprehensive Review”. En: *Fire* 7.8 (2024). ISSN: 2571-6255. DOI: 10.3390/fire7080268. URL: <https://www.mdpi.com/2571-6255/7/8/268>.
- [32] H. K. Versteeg y W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Segunda Edición. Pearson Education, 2007.
- [33] F. Moukalled, L. Mangani y M. Darwish. “Introduction”. En: *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab*. Cham: Springer International Publishing, 2016, págs. 3-8. ISBN: 978-3-319-16874-6. DOI: 10.1007/978-3-319-16874-6_1. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-319-16874-6_1.
- [34] Frank M. White. *Fluid Mechanics*. 4th. McGraw-Hill, 1998.
- [35] D. J. Mavriplis. *Revisiting the Least-squares Procedure for Gradient Reconstruction on Unstructured Meshes*. Inf. téc. Langley Research Center, dic. de 2003.
- [36] Christopher Greenshields y Henry Weller. *Notes on Computational Fluid Dynamics: General Principles*. Reading, UK: CFD Direct Ltd, 2022.

- [37] Ernst. Hairer y Gerhard Wanner. “Solving Ordinary Differential Equations II”. En: *Stiff and Differential-Algebraic Problems*. Springer Berlin, Heidelberg, 2010. ISBN: 978-3-642-05221-7. DOI: 10.1007/978-3-642-05221-7. URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-05221-7>.
- [38] Zhilei Wang et al. “Experiment study on the pressure and flame characteristics induced by high-pressure hydrogen spontaneous ignition”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (35 jul. de 2020), págs. 18042-18056. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2020.04.051.
- [39] Eric W. Lemmon et al. *Thermophysical Properties of Fluid Systems*. Ed. por Eds. P.J. Linstrom y W.G. Mallard. NIST Standard Reference Database Number 69. Gaithersburg MD, 20899. DOI: <https://doi.org/10.18434/T4D303>. (Visitado 12-06-2025).
- [40] Viatcheslav Bykov et al. “Model reduction and mechanism comparison of hydrogen/oxygen auto-ignition”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 37.1 (2019), págs. 781-787. ISSN: 1540-7489. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.06.189>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748918303754>.
- [41] Bing Wang et al. “Construction of one-step H₂/O₂ reaction mechanism for predicting ignition and its application in simulation of supersonic combustion”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 41.42 (2016), págs. 19191-19206. ISSN: 0360-3199. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.09.010>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319915304973>.
- [42] Alejandro Millán-Merino y Pierre Boivin. “A new single-step mechanism for hydrogen combustion”. En: *Combustion and Flame* 268 (2024), pág. 113641. ISSN: 0010-2180. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113641>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001021802400350X>.
- [43] P. Boivin et al. “An explicit reduced mechanism for H₂–air combustion”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 33.1 (2011), págs. 517-523. ISSN: 1540-7489. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.05.002>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748910000039>.
- [44] Pierre Boivin, Antonio L. Sánchez y Forman A. Williams. “Four-step and three-step systematically reduced chemistry for wide-range H₂–air combustion problems”. En: *Combustion and Flame* 160.1 (2013), págs. 76-82. ISSN: 0010-2180. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.09.014>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218012002751>.
- [45] Guido Saccone y Marco Marini. “Chemical Kinetic Analysis of High-Pressure Hydrogen Ignition and Combustion toward Green Aviation”. En: *Aerospace* 11.2 (2024). ISSN: 2226-4310. DOI: 10.3390/aerospace11020112. URL: <https://www.mdpi.com/2226-4310/11/2/112>.
- [46] Marcus Ó Conaire et al. “A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation”. En: *International Journal of Chemical Kinetics* 36 (11 nov. de 2004), págs. 603-622. ISSN: 0538-8066. DOI: 10.1002/kin.20036.
- [47] L. Lucchese. *Implementation of non-reflecting boundary conditions in OpenFOAM*. Ed. por H. Nilsson. 2022. DOI: 10.17196/OS_CFD#YEAR_2022.
- [48] Bonnie J. McBride, Sanford Gordon y Martin A. Reno. *Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species*. Oct. de 1993.

Apéndice A

Matriz de decisión del caso de estudio

N°	Título	DOI	Disponi- bilidad datos experi- mentales	Claridad del montaje experimental	Variables Inde- pen- dientes	Variables Dependientes	Disponi- bilidad Datos experi- mentales	Claridad del montaje Experi- mental	Variables depen- dientes	Variables Indepen- dientes	Año de Publica- ción	Actuali- dad del artículo	Puntajes (0-1)
1	Self-ignition and explosion during discharge of high-pressure hydrogen	10.1016/j.jlp.2007.06.008	Gráficas	Geometría y dimensiones especificadas	Longitud, diámetro y presión	Ocurrencia de la autoignición	0.40	1.00	0.75	0.33	2008	0.08	0.50
2	Shock-induced ignition of hydrogen gas during accidental or technical opening of high-pressure tanks	10.1016/j.jlp.2007.03.014	Gráficas	Geometría y dimensiones especificadas	Longitud, diámetro y presión	Ocurrencia de la autoignición	0.40	1.00	0.75	0.33	2007	0.00	0.48
3	Characterization of high-pressure, underexpanded hydrogen-jet flames	10.1016/j.ijhydene.2006.08.037	Gráficas	Geometría y dimensiones especificadas	Presión	Geometría de la Llama	0.40	1.00	0.25	0.33	2007	0.00	0.41
4	Experiment study on the pressure and flame characteristics induced by high-pressure hydrogen spontaneous ignition	10.1016/j.ijhydene.2020.04.051	Gráficas y datos escritos	Geometría y dimensiones especificadas	Longitud, diámetro, tiempo y presión	Ocurrencia de la autoignición, transición de autoignición a explosión	0.60	1.00	0.75	1.00	2020	1.00	0.84
5	Hydrogen release from a high pressure gaseous hydrogen reservoir in case of a small leak	10.1016/j.ijhydene.2010.05.069	Gráficas	Especificaciones de dimensiones no detalladas	Longitud, diámetro y presión	Velocidad de la onda de choque	0.40	0.33	0.75	0.33	2011	0.31	0.41
6	Experimental study on spontaneous ignition and flame propagation of high-pressure hydrogen release through tubes	10.1016/j.ijhydene.2019.06.188	Gráficas	Geometría y dimensiones especificadas	Longitud y Presión	Ocurrencia de la autoignición, y velocidad de la llama	0.40	1.00	0.50	0.67	2019	0.92	0.68
7	Experimental study on shock wave propagation and spontaneous ignition induced by high-pressure hydrogen suddenly released into T-shaped tubes	10.1016/j.ssci.2020.104694	Gráficas	Geometría y dimensiones especificadas	Longitud, geometría, tiempo y presión	Ocurrencia de la autoignición, sobrepresión, tamaño de la llama	0.40	1.00	1.00	1.00	2020	1.00	0.82
8	A flow visualization study on self-ignition of high pressure hydrogen gas released into a tube	10.1016/j.proci.2012.07.020	Gráficas	Geometría y dimensiones especificadas	Presión	Ocurrencia de la autoignición	0.40	1.00	0.25	0.33	2013	0.46	0.50
9	Effects of a wall on the self-ignition patterns and flame propagation of high-pressure hydrogen release through a tube	10.1016/j.proci.2012.09.001	Fotografías	Dimensiones especificadas	Presión y rugosidad de las paredes en la tubería	Ocurrencia de la autoignición	0.20	0.67	0.50	0.33	2013	0.46	0.41
10	Visualization of spontaneous ignition under controlled burst pressure	10.1016/j.ijhydene.2016.06.240	Fotografías	Dimensiones especificadas	Presión, burst pressure y tiempo	Velocidad y posición de la onda de choque	0.20	0.67	0.75	1.00	2017	0.77	0.61
11	Self-ignition and flame propagation of high-pressure hydrogen jet during sudden discharge from a pipe	10.1016/j.ijhydene.2009.04.079	Fotografías, gráficas y tabla de datos	Geometría y dimensiones especificadas	Presión, dos diámetros, longitud	Velocidad promedio de la onda de choque, ocurrencia de autoignición, primera posición detectada de la llama	1.00	1.00	0.75	1.00	2009	0.15	0.79
12	Effects of the geometry of downstream pipes with different angles on the shock ignition of high-pressure hydrogen during its sudden expansion	10.1016/j.ijhydene.2017.02.025	Fotografías y gráficas	Geometría y dimensiones especificadas	Presión, ángulo de la tubería	Velocidad media de la onda de choque	0.80	1.00	0.25	1.00	2017	0.77	0.78
13	An experimental study on the mechanism of self-ignition of high-pressure hydrogen	10.1016/j.ijhydene.2016.06.046	Gráficas	Geometría y dimensiones especificadas	Presión	Velocidad de la onda de choque	0.40	1.00	0.25	0.33	2017	0.77	0.56