

# Simulación computacional del transporte de hidrógeno

Dayana Gómez (dayana.gomezr@upb.edu.co)

Valentina Galindo (valentina.galindo@upb.edu.co)

Melissa Osorio (loren.osorio@upb.edu.co)

Juan David Parra (juan.parrac.col@upb.edu.co)

Septiembre 2024

## Abstract

El transporte de hidrógeno plantea importantes retos debido a la permeabilidad y difusión a través de materiales como el polietileno (PE). Este artículo presenta una simulación computacional para modelar estos procesos, incorporando las ecuaciones de difusión en coordenadas cilíndricas y evaluando la permeabilidad del hidrógeno en PE bajo diferentes condiciones.

## 1 Introducción

El impacto del cambio climático ha impulsado la necesidad de buscar fuentes de energía alternativas más limpias. En este contexto, el hidrógeno ha emergido como una fuente prometedora debido a su capacidad para generar energía limpia y libre de carbono. Sin embargo, uno de los mayores desafíos en su implementación es el transporte y almacenamiento seguros, particularmente debido a la fragilización de los materiales y la permeabilidad del hidrógeno en los mismos (Kanesugi et al., 2022).

El polietileno (PE) ha sido propuesto como un material alternativo para la construcción de tuberías en el transporte de hidrógeno, dado que reduce el riesgo de fragilización observado en las tuberías metálicas (Zheng et al., 2022). Sin embargo, la permeabilidad del hidrógeno en el PE plantea problemas de seguridad, como fugas que pueden llevar a explosiones si no se manejan adecuadamente (Zhao et al., 2022).

## 2 Planteamiento del Problema

La creciente preocupación por el cambio climático, impulsada por el calentamiento global, ha puesto de relieve la urgencia de reducir las emisiones de dióxido de carbono (CO) procedentes del consumo de energía. En este contexto, la energía del hidrógeno ha sido ampliamente estudiada por su potencial como fuente de energía limpia, eficiente, renovable y libre de carbono (Kanesugi et al., 2022). Sin embargo, su transporte y almacenamiento plantean desafíos críticos, especialmente cuando se transporta a través de tuberías metálicas, donde el hidrógeno puede provocar fragilización y otros daños que comprometen la seguridad (Zheng et al., 2022).

El polietileno (PE) ha emergido como un candidato prometedor para el transporte de hidrógeno comprimido en aplicaciones como las tuberías, ofreciendo una solución más segura en comparación con las metálicas al reducir el riesgo de fragilización. No obstante, la permeabilidad del hidrógeno a través de las tuberías de PE sigue siendo un problema importante. La estructura del PE amorfo facilita la difusión del hidrógeno, mientras que el PE cristalino actúa como una barrera más efectiva (Zhao et al., 2022).

Una de las mayores preocupaciones en el uso de PE para el transporte de hidrógeno es la posibilidad de fugas de gas, lo que incrementa el riesgo de explosiones en caso de que el hidrógeno entre en contacto con oxígeno en concentraciones específicas. Estas fugas no solo representan una pérdida de energía valiosa, sino que también constituyen un riesgo grave para la seguridad en entornos industriales y residenciales (Zhao et al., 2022). A pesar de sus ventajas, es crucial mejorar las propiedades de permeabilidad del PE para minimizar estos riesgos (Zheng et al., 2022).

Además, los experimentos en laboratorio que implican el manejo de hidrógeno comprimido a alta presión presentan peligros significativos. El hidrógeno es altamente inflamable y, debido a su baja masa molecular, puede filtrarse fácilmente a través de pequeñas fisuras o poros en los materiales de contención. Esto aumenta el riesgo de fugas indetectables que podrían provocar incendios o explosiones dentro de un entorno controlado (Zhao et al., 2022). La simulación computacional se convierte en una herramienta indispensable para estudiar el comportamiento del hidrógeno en diferentes materiales sin incurrir en los riesgos inherentes a los experimentos físicos en laboratorio.

La tecnología del hidrógeno, clave para el desarrollo de vehículos eléctricos de pila de combustible (FCEV) y sistemas de reabastecimiento de hidrógeno, requiere tuberías seguras y eficientes. Aunque el PE es una opción viable, se siguen investigando enfoques para mejorar su resistencia a la permeabilidad y reducir el riesgo de fugas (Zheng et al., 2022).

### 3 Ecuaciones de Difusión y Permeabilidad

El transporte de hidrógeno a través de materiales como el polietileno puede ser modelado utilizando la ecuación de difusión en coordenadas cilíndricas, que describe cómo cambia la concentración de hidrógeno en el tiempo y el espacio dentro del material. La ecuación de difusión en tres dimensiones para un sistema cilíndrico es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (1)$$

Donde:

- $C(r, \theta, z, t)$  es la concentración de hidrógeno,
- $D$  es el coeficiente de difusión.

Para problemas con simetría axial, la ecuación se simplifica a una dimensión en  $r$ :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) \right) \quad (2)$$

Condiciones de frontera

- **Condición de Dirichlet:** Concentración fija de hidrógeno en la frontera del material:

$$C(r = R, t) = C_0 \quad (3)$$

- **Condición de Neumann:** Flujo de hidrógeno nulo en el centro del cilindro:

$$\frac{\partial C}{\partial r}(r = 0, t) = 0 \quad (4)$$

La permeabilidad del hidrógeno a través del polietileno se describe mediante la Ley de Fick para el flujo:

$$J = -P \frac{\partial C}{\partial r} \quad (5)$$

Donde:

- $J$  es el flujo de hidrógeno,
- $P$  es el coeficiente de permeabilidad.

## 4 Métodos de Solución

Para resolver las ecuaciones de difusión y permeabilidad en coordenadas cilíndricas, se emplearon diversos métodos numéricos.

**Diferencias Finitas** El método de diferencias finitas fue empleado para discretizar la ecuación de difusión radialmente simplificada. Este método aproxima las derivadas temporales y espaciales mediante diferencias finitas en una malla de puntos. La ecuación de difusión en coordenadas cilíndricas se expresa como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) \right) \quad (6)$$

Al discretizar esta ecuación, se utiliza un esquema explícito para actualizar la concentración en cada nodo espacial. La condición de estabilidad de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) se asegura con el paso de tiempo  $\Delta t$  adecuado para la estabilidad numérica.

**Método de Elementos Finitos (FEM)** El método de elementos finitos (FEM) fue utilizado para resolver la ecuación de difusión en su forma débil. En este enfoque, se discretiza el dominio en elementos pequeños y se multiplica la ecuación diferencial por funciones de prueba. Esto produce un sistema de ecuaciones lineales que se resuelve en cada paso temporal.

La forma débil de la ecuación de difusión en coordenadas cilíndricas es:

$$\int_{\Omega} v \frac{\partial C}{\partial t} d\Omega = -D \int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla C d\Omega \quad (7)$$

**Monte Carlo Gran Canónico (GCMC) y Dinámica Molecular (MD)** El método Monte Carlo Gran Canónico (GCMC) se utilizó para simular la absorción y difusión del hidrógeno en materiales. Este método es adecuado para simular sistemas en contacto con un reservorio de partículas y energía, permitiendo que el número de partículas varíe. En este enfoque, la inserción o eliminación de partículas en el sistema sigue una probabilidad que depende del potencial químico ( $\mu$ ) y la temperatura ( $T$ ) del sistema.

La probabilidad de insertar una nueva partícula en una posición  $r$  se calcula como:

$$P_{\text{insertar}} = \min \left( 1, \exp \left( \frac{\mu - \Delta E}{k_B T} \right) \right) \quad (8)$$

Donde  $\Delta E$  es el cambio en energía debido a la inserción,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura. De manera similar, la probabilidad de eliminar una partícula se calcula como:

$$P_{\text{eliminar}} = \min \left( 1, \exp \left( \frac{\Delta E - \mu}{k_B T} \right) \right) \quad (9)$$

Por otro lado, el método de Dinámica Molecular (MD) se utiliza para simular el movimiento de partículas bajo la influencia de fuerzas interatómicas. La fuerza entre dos partículas  $i$  y  $j$  se calcula utilizando el potencial de Lennard-Jones:

$$V(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (10)$$

Donde  $\epsilon$  y  $\sigma$  son los parámetros del potencial, y  $r_{ij}$  es la distancia entre las partículas  $i$  y  $j$ . Las posiciones y velocidades de las partículas se actualizan utilizando el método de Verlet:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 \quad (11)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{f(t) + f(t + \Delta t)}{2m}\Delta t \quad (12)$$

Donde  $r(t)$  es la posición,  $v(t)$  es la velocidad,  $f(t)$  es la fuerza,  $m$  es la masa, y  $\Delta t$  es el paso de tiempo. Estos métodos combinados permiten simular tanto la inserción y eliminación de partículas como su movimiento dentro del sistema, proporcionando un modelo robusto para estudiar la difusión del hidrógeno en materiales permeables.

## 5 Bibliografía

Kanesugi, H., Ohyama, K., Fujiwara, H., Nishimura, S. (2022). High-pressure hydrogen permeability model for crystalline polymers. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(76), 32039-32048. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.09.205>

Zhao, J., Wang, X., Yang, Q., Yin, H., Zhao, B., Zhang, S., Wu, C. (2022). Molecular dynamics simulation of H<sub>2</sub> in amorphous polyethylene system: H<sub>2</sub> diffusion in various PE matrices and bubbling during rapid depressurization. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(77), 32512-32523. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.09.124>

Zheng, D., Li, J., Liu, B., Yu, B., Yang, Y., Han, D., Huang, Z. (2022). Molecular dynamics investigations into the hydrogen permeation mechanism of polyethylene pipeline material. *Journal of Molecular Liquids*, 364, 120773. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120773>

Barna, I. F., Mátyás, L. (2023). Analytical solution and numerical simulation of heat transfer in cylindrical- and spherical-shaped bodies. *Computation*, 11(7), 131. <https://doi.org/10.3390/computation11070131>

Kim, K.-T., Chung, N.-K., Baek, U.-B., Nahm, S.-H. (2022). Characterizing the diffusion property of hydrogen sorption and desorption processes in several spherical-shaped polymers. *Polymers*, 14(7), 1468. <https://doi.org/10.3390/polym14071468>

Wang, H., Fu, W., Jiang, Z., Zhao, C., Hua, Q. (2024). Mechanism for adsorption, dissociation, and diffusion of hydrogen in high-entropy alloy AlCrTiNiV: First-principles calculation. *Nanomaterials*, 14(17), 1391. <https://doi.org/10.3390/nano14171391>

Barabás, J., Jovicic, V., Delgado, A. (2022). Simulation of a hydrogen-air diffusion flame under consideration of component-specific diffusivities. *Applied Sciences*, 12(6), 3138. <https://doi.org/10.3390/app12063138>

Numerical modeling of anisotropic particle diffusion through a cylindrical channel. (2020). *MDPI Applied Sciences*, 10(12), 4203. <https://www.mdpi.com/2076-3417/10/12/4203>