

Difusión y Permeabilidad del Hidrógeno en Coordenadas Cilíndricas

Juan David Parra

September 25, 2024

1 Introducción

Este documento describe las ecuaciones fundamentales para modelar tanto la difusión como la permeabilidad del hidrógeno en un material cilíndrico. Se presentan las ecuaciones de difusión en coordenadas cilíndricas, las condiciones de frontera, así como las ecuaciones que describen el comportamiento del flujo y la permeabilidad, basadas en la Ley de Fick.

2 Ecuación de difusión en coordenadas cilíndricas

La ecuación de difusión del hidrógeno en coordenadas cilíndricas en tres dimensiones es:

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

Donde:

- $C(r, \theta, z, t)$ es la concentración de hidrógeno en el material,
- D es el coeficiente de difusión,
- r, θ, z son las coordenadas cilíndricas.

2.1 Simplificación radial

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

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

3 Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera para resolver la ecuación de difusión en un cilindro son:

3.1 Condición de Dirichlet

Concentración fija de hidrógeno en la frontera del material:

$$C(r = R, t) = C_0$$

3.2 Condición de Neumann

Flujo de hidrógeno nulo en el centro del cilindro:

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

4 Ecuaciones de permeabilidad del hidrógeno

La permeabilidad describe la capacidad de un material para permitir el paso de hidrógeno bajo un gradiente de concentración. El flujo de hidrógeno J a través de un material en coordenadas cilíndricas puede expresarse mediante la **Ley de Fick** como:

$$J = -P \frac{\partial C}{\partial r}$$

Donde:

- J es el flujo de hidrógeno en la dirección radial,
- P es el coeficiente de permeabilidad,
- $\frac{\partial C}{\partial r}$ es el gradiente de concentración de hidrógeno en la dirección radial.

El flujo de hidrógeno depende directamente de la permeabilidad del material y del gradiente de concentración. Para materiales donde el hidrógeno se difunde a través de barreras permeables, la ecuación general se ajusta a esta ley.

5 Relaciones entre difusión y permeabilidad

Es importante destacar la relación entre el coeficiente de difusión D , el coeficiente de permeabilidad P , y la solubilidad S . En muchos casos, la permeabilidad puede expresarse como:

$$P = D \cdot S$$

Donde:

- D es el coeficiente de difusión, que describe la rapidez con la que el hidrógeno se mueve a través del material,
- S es el coeficiente de solubilidad, que describe la cantidad de hidrógeno que puede ser absorbida por el material.

6 Deformaciones debido a la permeabilidad

El proceso de permeabilidad del hidrógeno puede generar deformaciones en el material debido a la absorción y difusión del gas. Las deformaciones radiales y tangenciales en coordenadas cilíndricas son:

6.1 Deformación radial

$$\varepsilon_r = \frac{\partial u_r}{\partial r}$$

Donde u_r es el desplazamiento radial.

6.2 Deformación tangencial

$$\varepsilon_\theta = \frac{u_r}{r}$$

7 Ecuación de equilibrio radial

Cuando el hidrógeno se difunde en el material, la ecuación de equilibrio radial asegura que los esfuerzos internos están balanceados. Esta ecuación es:

$$\frac{d\sigma_r}{dr} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} = 0$$

Donde:

- σ_r es el esfuerzo radial,
- σ_θ es el esfuerzo tangencial.

8 Relación esfuerzo-deformación con deformaciones térmicas

Cuando hay cambios de temperatura en el material debido a la difusión de hidrógeno, las ecuaciones esfuerzo-deformación incluyen el efecto de la expansión térmica. Las ecuaciones son:

8.1 Esfuerzo radial

$$\sigma_r = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} ((1 - \nu)\varepsilon_r + \nu\varepsilon_\theta) - \alpha\Delta T$$

8.2 Esfuerzo tangencial

$$\sigma_\theta = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} ((1 - \nu)\varepsilon_\theta + \nu\varepsilon_r) - \alpha\Delta T$$

Donde:

- E es el módulo de Young,
- ν es el coeficiente de Poisson,
- α es el coeficiente de expansión térmica,
- ΔT es el cambio de temperatura.

9 Conclusión

En este documento hemos presentado un conjunto de ecuaciones que describen la difusión y la permeabilidad del hidrógeno en un material cilíndrico. Estas ecuaciones incluyen las relaciones fundamentales entre la concentración, el flujo y las deformaciones generadas por la interacción entre el hidrógeno y el material, proporcionando una base para el análisis estructural y de transporte.