**Simulación computacional del transporte de hidrogeno**

**Estado del Arte**

**Contexto Energético y Cambio Climático**

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 (CO₂) procedentes del consumo de energía. Las fuentes tradicionales de energía, como los combustibles fósiles, son las principales responsables de estas emisiones, lo que ha llevado a la búsqueda de alternativas más limpias y sostenibles. 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, Ohyama, Fujiwara & Nishimura, 2022).

El hidrógeno, utilizado en diversas aplicaciones energéticas, ofrece ventajas significativas frente a los combustibles fósiles tradicionales. 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 inducidos que comprometen la seguridad (Zheng et al., 2022). Para mitigar estos riesgos, se han explorado materiales alternativos como el polietileno (PE) para la construcción de tuberías, debido a sus ventajas como material liviano, de fácil instalación y bajo costo. No obstante, el uso de PE presenta su propio conjunto de desafíos, particularmente en lo que respecta a la permeación y fuga de gas (Zheng et al., 2022).

**Transporte de Hidrógeno a través de Polietileno (PE)**

El polietileno (PE) ha emergido como un candidato prometedor para el transporte de hidrógeno comprimido en aplicaciones como las tuberías. Las tuberías de PE ofrecen una solución más segura en comparación con las metálicas, ya que reducen el riesgo de fragilización. Además, su bajo costo y facilidad de instalación lo convierten en una opción atractiva para infraestructuras de transporte de hidrógeno. Sin embargo, la permeación del gas a través de las tuberías de PE plantea un problema importante. Debido a las características físicas del hidrógeno, que es una de las moléculas más pequeñas, la permeabilidad en el PE es considerablemente alta, lo que incrementa el riesgo de combustión y explosión si ocurre una fuga de gas (Zheng et al., 2022).

La permeabilidad del hidrógeno en el PE se debe en parte a la estructura de este material, donde la difusión sigue un mecanismo de "salto", en el cual las moléculas de hidrógeno vibran en los poros de volumen libre y saltan a poros adyacentes para completar el proceso de difusión. Este mecanismo de permeación es más evidente en el PE amorfo que en su contraparte cristalina, donde la densidad estructural restringe la difusión del gas (Zhao et al., 2022). Las tuberías de PE también deben cumplir estrictos requisitos de seguridad, ya que el hidrógeno es un gas inflamable y explosivo. Por lo tanto, es crucial minimizar la permeación del hidrógeno a través de las paredes de las tuberías de PE para reducir la pérdida de energía y el riesgo de incidentes (Zheng et al., 2022).

**Aplicaciones del Hidrógeno y Necesidades de Transporte**

La tecnología de hidrógeno se ha consolidado como un pilar en el desarrollo de vehículos eléctricos de pila de combustible (FCEV) y sistemas de reabastecimiento de hidrógeno (HRS). En estas aplicaciones, el hidrógeno se almacena y transporta a alta presión, generalmente a 70 MPa, para garantizar una adecuada densidad energética (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara & Nishimura, 2022). Los componentes clave en estos sistemas incluyen recipientes de almacenamiento y mangueras de distribución, que requieren materiales capaces de soportar la presión sin comprometer la seguridad. La permeabilidad del hidrógeno a través de los materiales utilizados en estos sistemas sigue siendo un desafío técnico importante. Aunque el PE es un material ampliamente utilizado, se están desarrollando nuevos enfoques para mejorar su capacidad de resistencia a la permeación y reducir el riesgo de fugas (Zhao et al., 2022).

**Investigación sobre la Permeabilidad y Estructura del Polietileno**

Los estudios sobre la permeabilidad del hidrógeno en polietileno han demostrado que los polímeros amorfos, como el PE, son más propensos a la permeación de gases. La estructura morfológica del PE juega un papel crítico en este fenómeno, ya que las regiones amorfas permiten una mayor difusión del hidrógeno, mientras que las regiones cristalinas actúan como barreras más eficaces. El diseño de materiales poliméricos con una estructura de orden superior es fundamental para controlar la permeabilidad del hidrógeno y garantizar una mayor eficiencia en los sistemas de almacenamiento y transporte de hidrógeno comprimido (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara & Nishimura, 2022).

Recientes avances han permitido evaluar la permeabilidad del hidrógeno en diferentes tipos de PE bajo condiciones de alta presión. Los estudios han utilizado tanto métodos de estado estacionario como análisis de desorción térmica (TDA) para medir la permeabilidad del hidrógeno en muestras de PE expuestas a presiones de hasta 100 MPa (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara & Nishimura, 2022). Los resultados de estas investigaciones han revelado que la permeabilidad del hidrógeno varía significativamente según la cristalinidad del PE, lo que subraya la importancia de diseñar materiales poliméricos con estructuras cristalinas optimizadas para minimizar la fuga de gas (Zhao et al., 2022).

**Métodos de Análisis y Parámetros**

Para investigar la permeabilidad del hidrógeno en PE, los investigadores han empleado simulaciones de Monte Carlo Gran Canónico y dinámica molecular (MD). Estas técnicas han permitido analizar la solubilidad y difusión del hidrógeno en el PE amorfo, considerando variables como la temperatura (270-310 K) y la presión (0.1-0.7 MPa) (Zheng et al., 2022). Los coeficientes de solubilidad, difusión y permeabilidad del hidrógeno en PE amorfo aumentan con el incremento de la temperatura, y sus relaciones con esta variable siguen la ley de Arrhenius. Estos modelos proporcionan una base sólida para predecir el comportamiento del hidrógeno en diferentes condiciones de operación y optimizar el diseño de materiales poliméricos para su uso en aplicaciones de transporte y almacenamiento de hidrógeno comprimido (Zheng et al., 2022).

Bibliografía

Kanesugi, H., Ohyama, K., Fujiwara, H., & Nishimura, S. (2022). High-pressure hydrogen permeability model for crystalline polymers. *ScienceDirect*. doi: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 H2 in amorphous polyethylene system: H2 diffusion in various PE matrices and bubbling during rapid depressurization. *ScienceDirect*. doi: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. *ScienceDirect*. doi:https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120773.