

Proyecto métodos numéricos.

# SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DEL TRANSPORTE DE HIDROGENO.

Juan David Parra  
Dayana Gómez  
Valentina Galindo  
Melissa Osorio

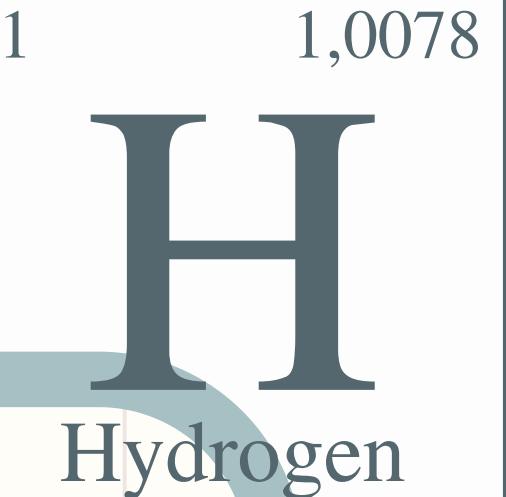
# PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

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 ( $\text{CO}_2$ ) 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.

# Impacto.

- Aumento en la temperatura global, lo que lleva a cambios en los patrones climáticos y extremos climáticos.
- Pérdida de biodiversidad.
- Aumento en las enfermedades respiratorias.
- Efectos en la salud mental.
- Aumento del riesgo de enfermedades cardiovasculares.





# Possible Solución.

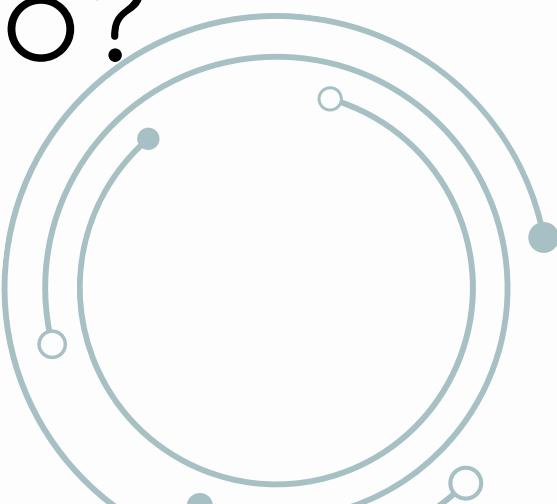
La energía del hidrógeno ha sido ampliamente estudiada por su potencial como fuente de energía limpia, eficiente, renovable y libre de carbono (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara & Nishimura, 2022).

Sin embargo, su transporte y almacenamiento plantean desafíos críticos, especialmente su transporte a través de tuberías metálicas, debido a los fenómenos de fragilización, permeabilidad y difusión.

# Pregunta a resolver.



¿Cómo a través de los métodos numéricos se puede estudiar los fenómenos de permeabilidad y difusión del hidrógeno frente a diferentes materiales para lograr su transporte y almacenamiento seguro?

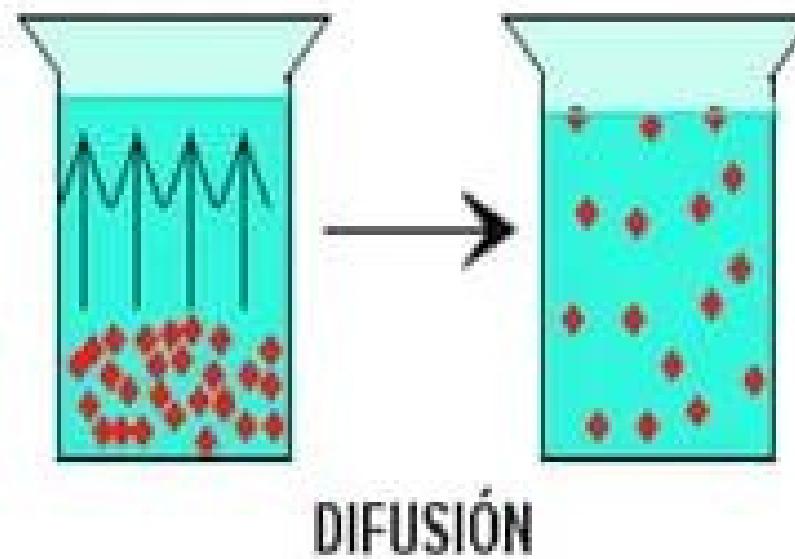


01

Investigación:  
Fase Inicial.

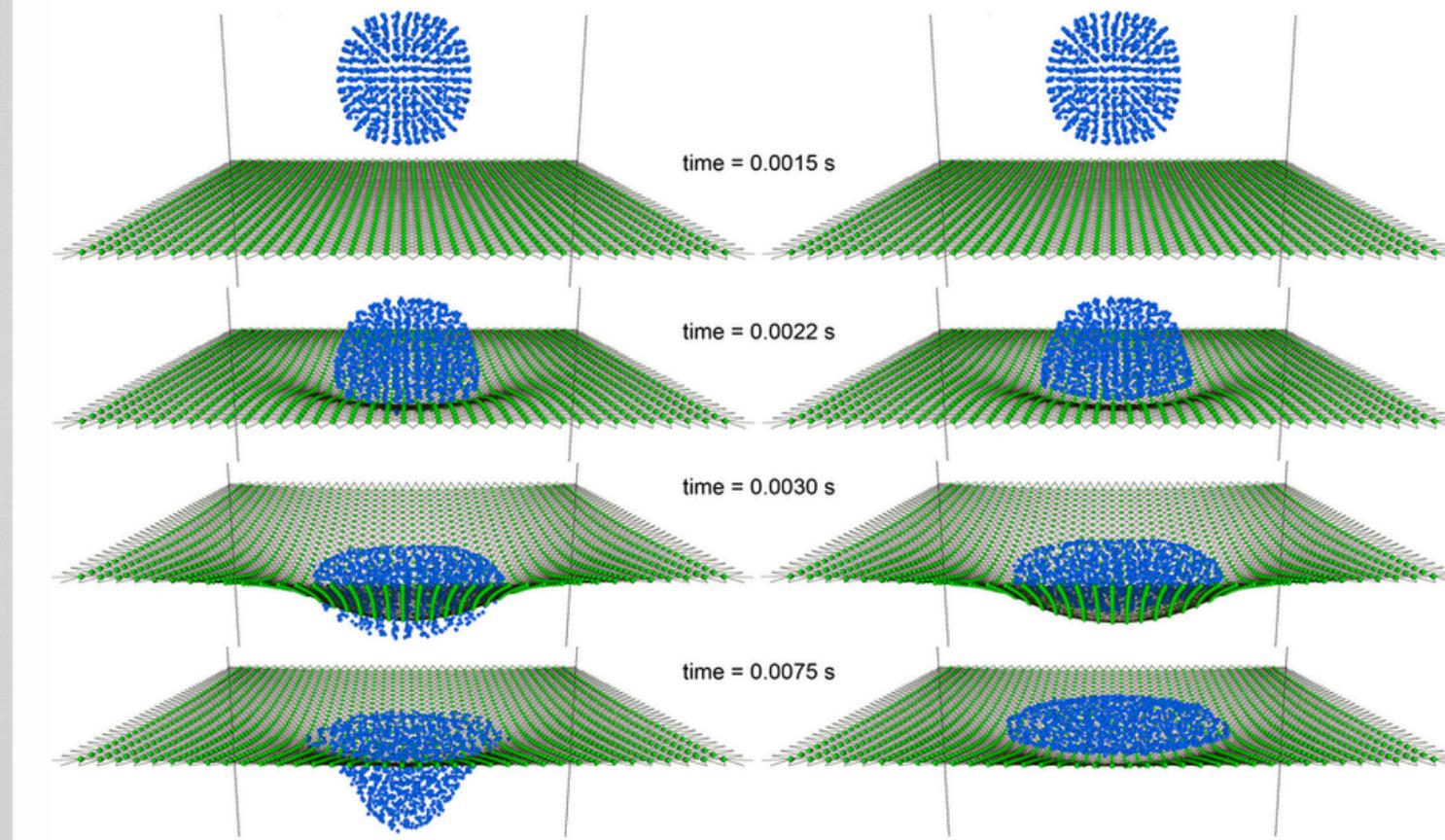
# Fenómenos a estudiar.

## Difusión



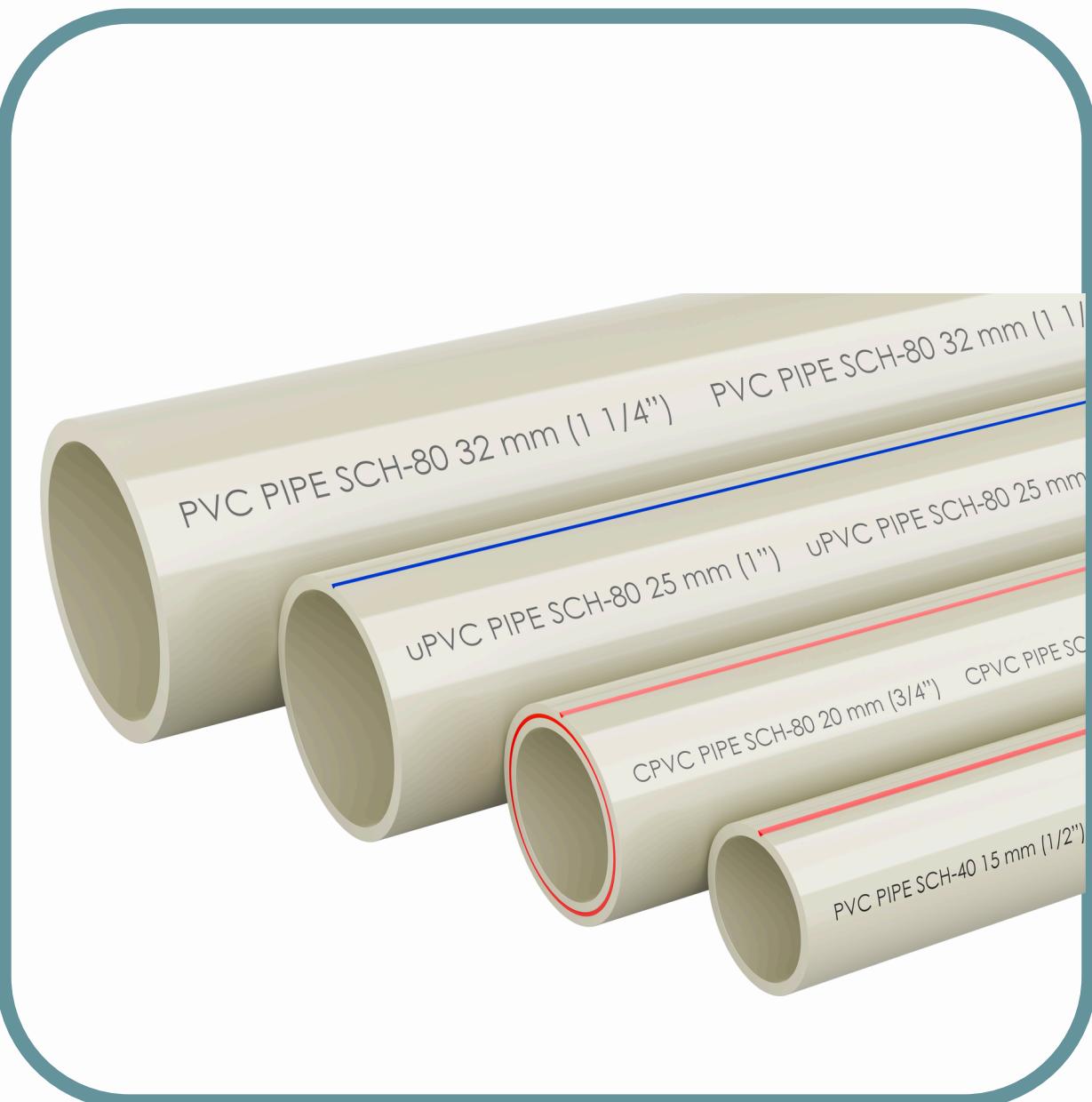
DIFUSIÓN

## Permeabilidad



# Material mas optimo

## TUBERIA DE PE.

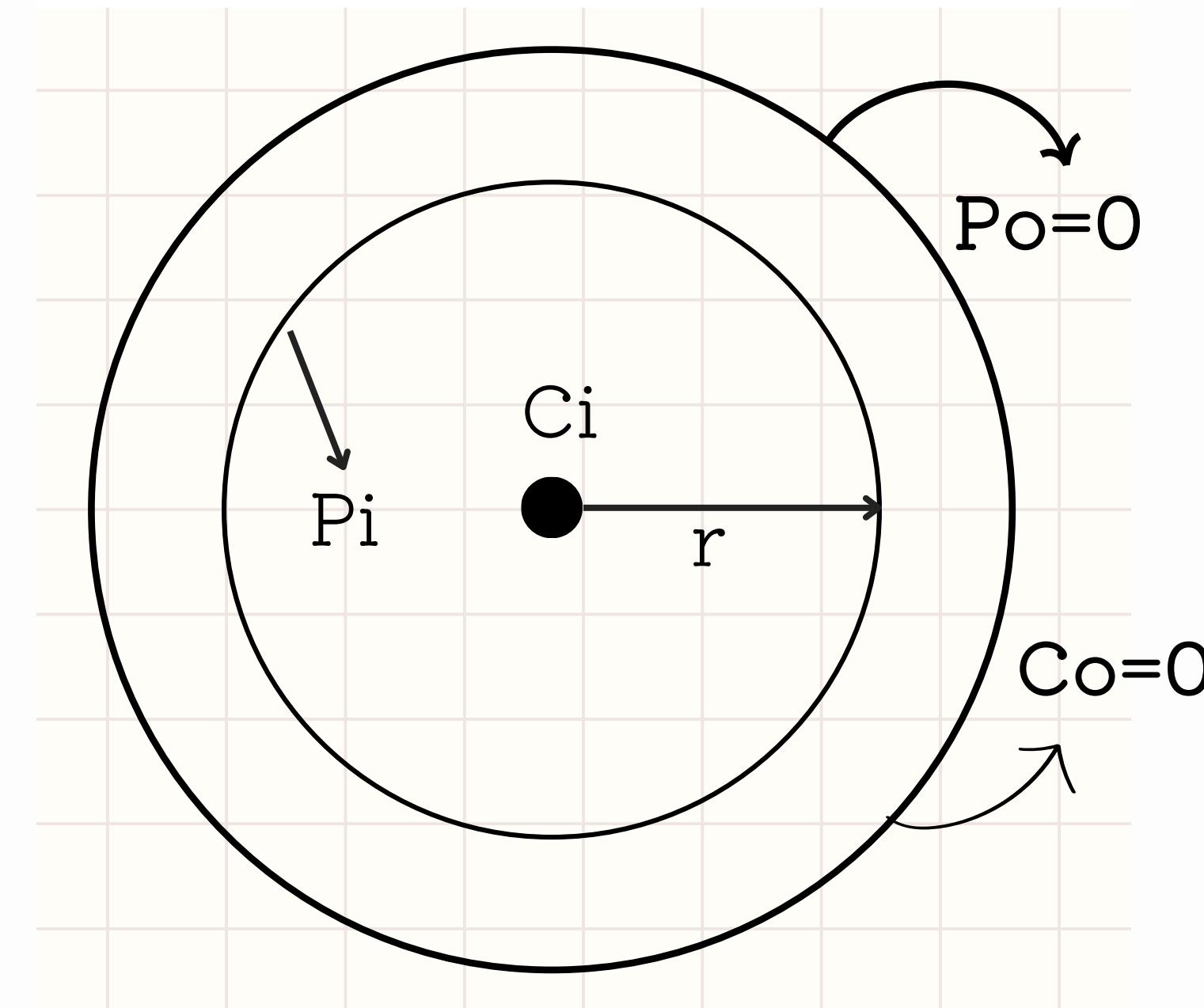


Solución más segura en comparación con las metálicas, ya que reducen el riesgo de fragilización.

Bajo costo y facilidad de instalación lo convierten en una opción viable para el transporte de hidrógeno.

Sin embargo, la permeabilidad del hidrogeno 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).

# MODELOS DE CALCULO



Modelación a través del  
material cilíndrico.

# Modelo 1.

Ecuación de difusión en coordenadas cilíndricas.

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

Simplificación radial.

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

## Ecuación de permeabilidad del hidrógeno

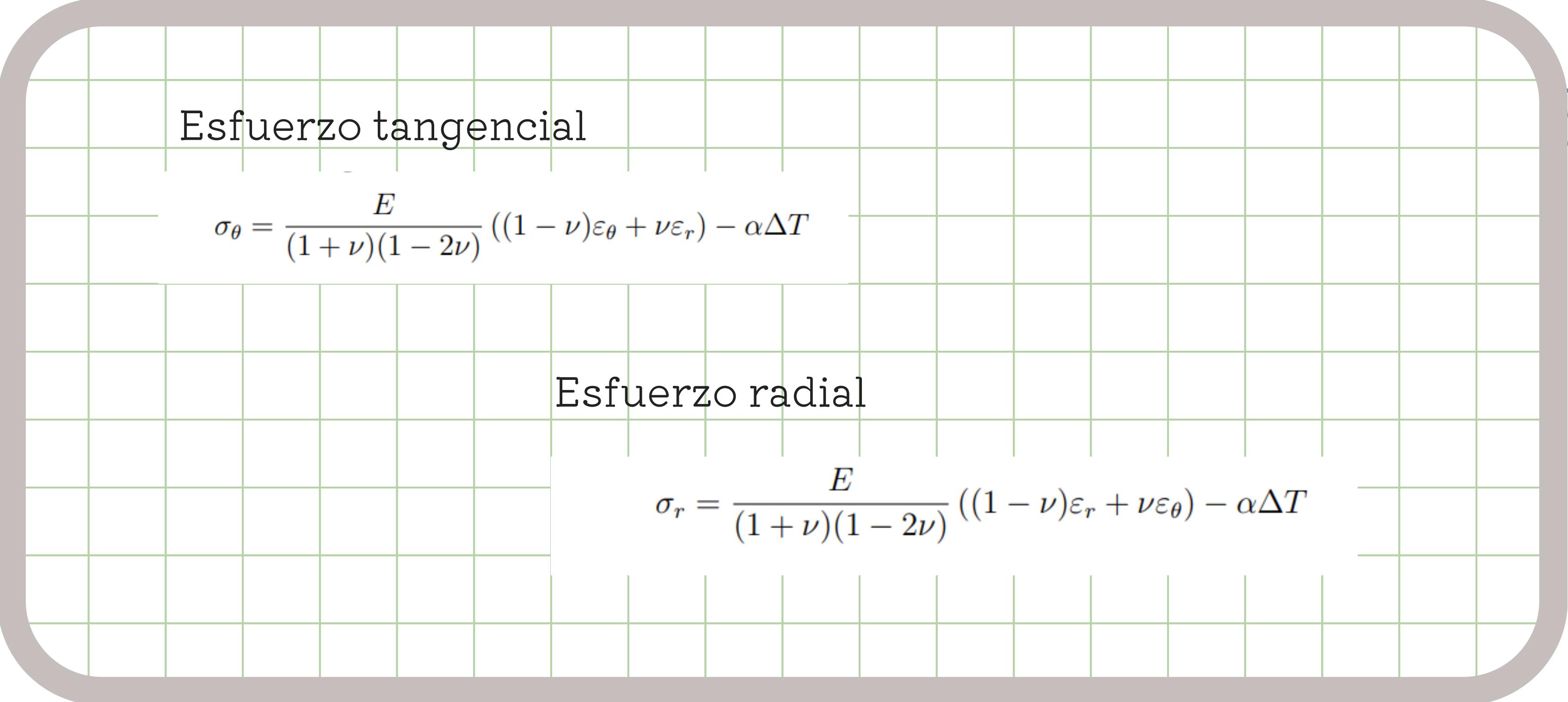
$$J = -P \frac{\partial C}{\partial r}$$

Deformación tangencial

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

Deformación radial

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

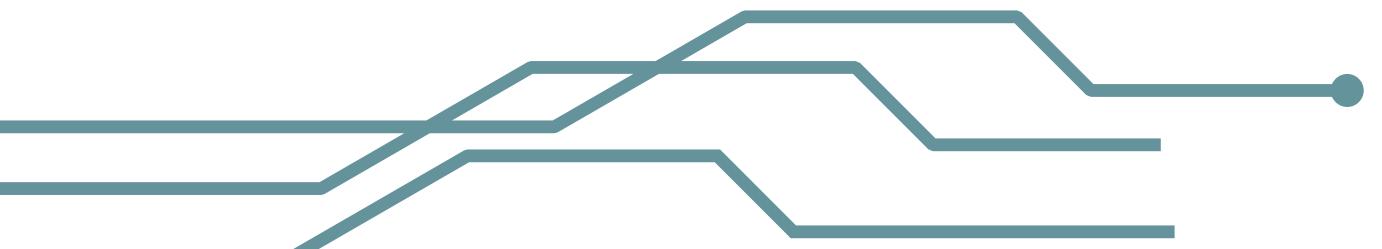


Esfuerzo tangencial

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

Esfuerzo radial

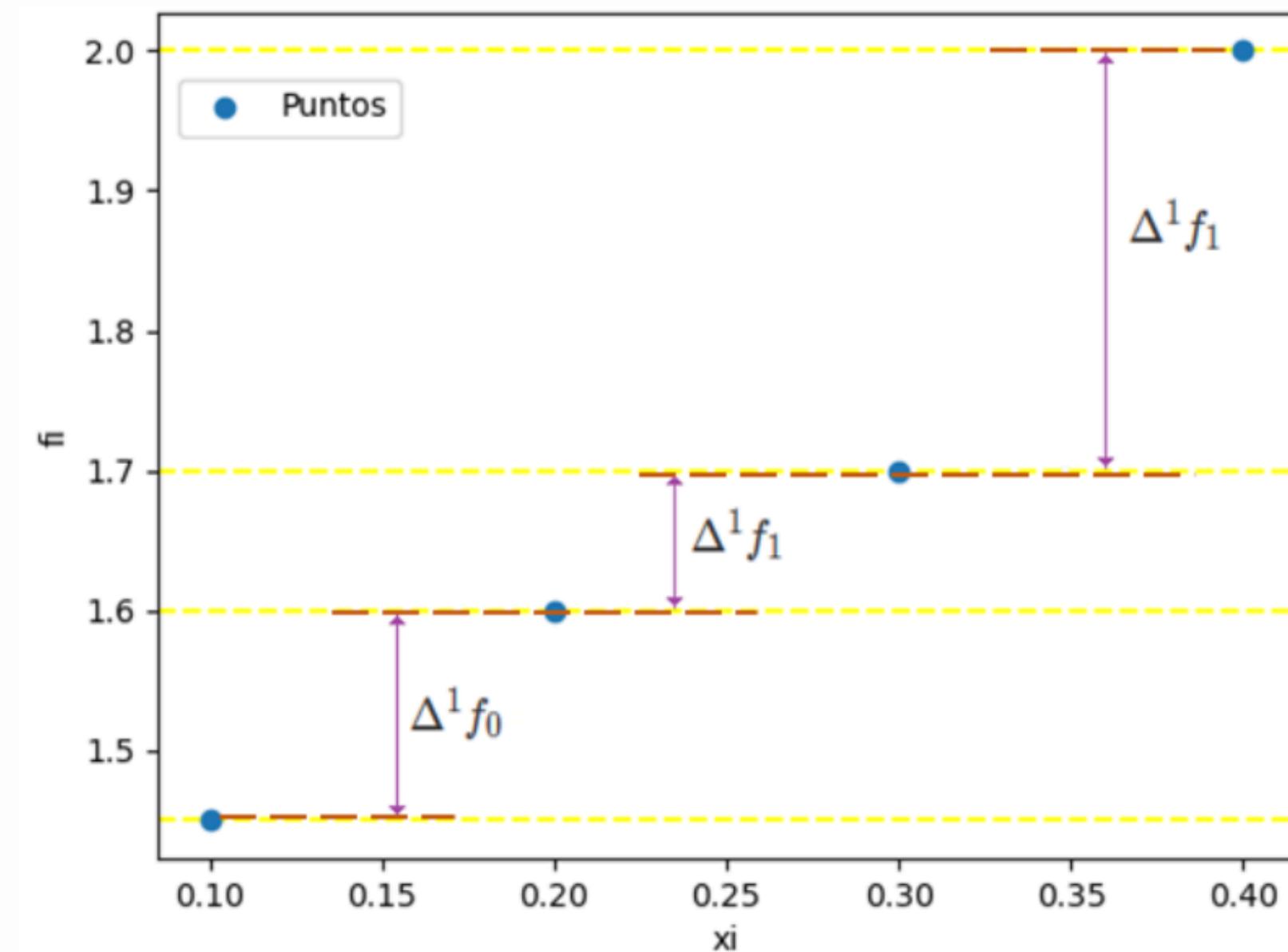
$$\sigma_r = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} ((1-\nu)\varepsilon_r + \nu\varepsilon_\theta) - \alpha\Delta T$$



# MODELOS DE SOLUCIÓN.

## Diferencias finitas.

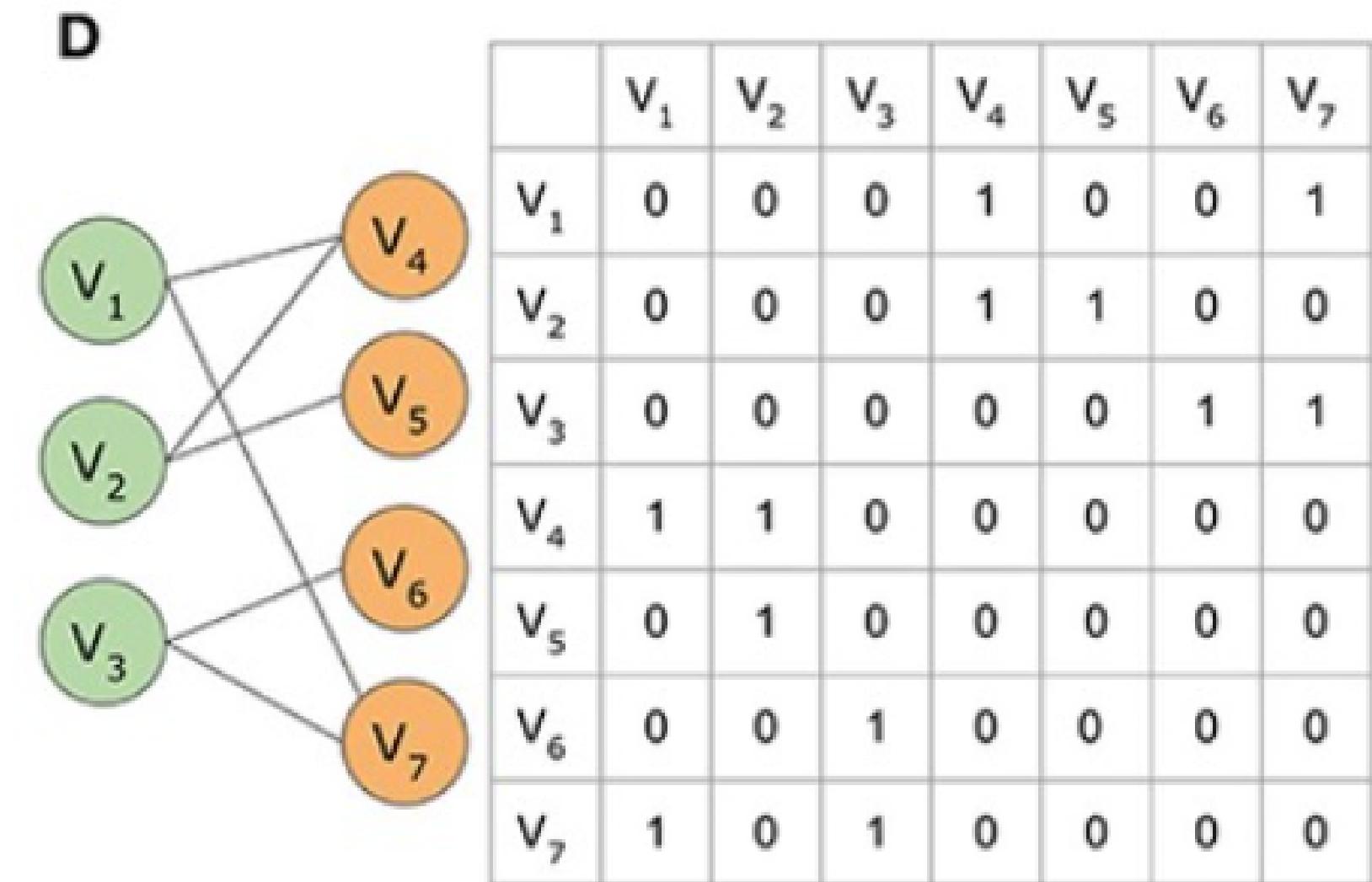
Establece relaciones entre los puntos que describen una función, este modelo es un elemento base para métodos de interpolación.



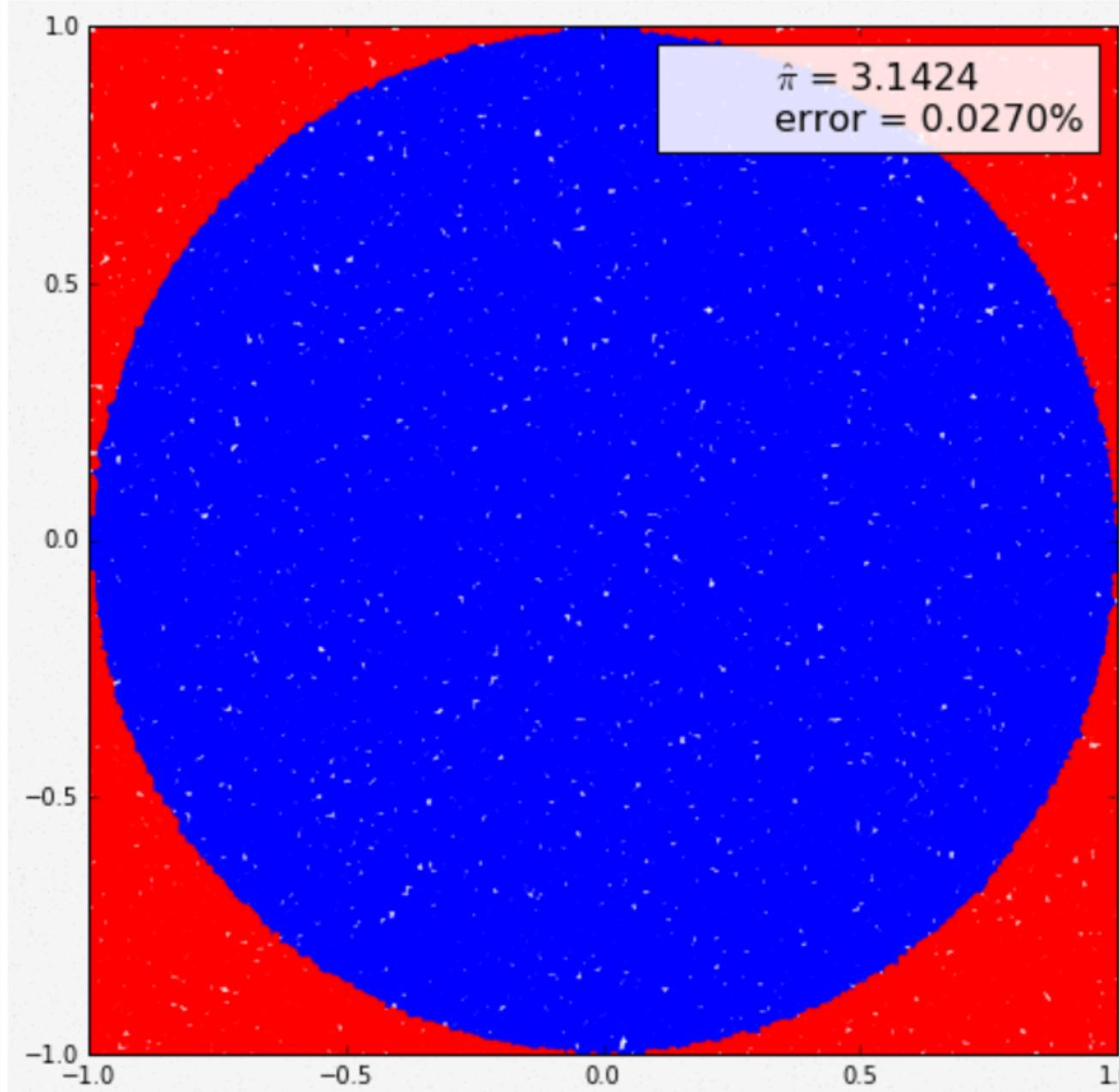
# MODELOS DE SOLUCIÓN.

## Elementos Finitos (FEM). Nodos de Frontera Matricial Lagrangianos.

La idea principal es dividir el dominio del problema en elementos finitos y utilizar nodos (punto de unión de los elementos con sus adyacentes ) para discretizar la solución por medio de la interpolación de los valores conocidos en los nodos.



# MODELOS DE SOLUCIÓN.



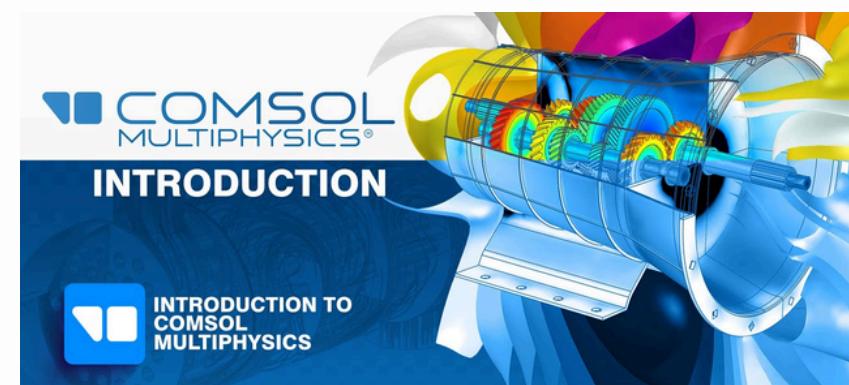
*Ejemplo: Aproximando el valor de pi - área de un círculo. (1000 experimentos)*

## Monte Carlo Gran Casino con Dinámica Molecular

Técnica que analiza fenómenos por algoritmos computacionales que dependen de números aleatorios, es decir, que crea un flujo finito de variables aleatorias para cualquier tipo de distribución.

# Herramientas de modelamiento.

- WSL (Ubuntu) : Entorno de Linux para la simulación de mallas de solución de ecuaciones.
- COMSOL: Para la simulación física del fenómeno de difusión y permeabilidad.
- Fenicsx : Como sistemas de mallado junto a pyvista para visualización de imágenes 3D.



# REFERENCIAS

- 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. MDPI. Retrieved from <https://www.mdpi.com/2076-3417/10/12/4203>.



MUCHAS  
GRACIAS.