

# USO DE HIDRÓGENO COMO ADITIVO PARA COMBUSTIÓN DOMÉSTICA: ANÁLISIS ESTEQUIOMÉTRICO

***Víctor Manuel Sámano Ortega***

Tecnológico Nacional de México en Celaya

*M1703097@itcelaya.edu.mx*

***Nicolás Guerrero Chávez***

Tecnológico Nacional de México en Celaya

*M1703098@itcelaya.edu.mx*

***José Martín Medina Flores***

Tecnológico Nacional de México en Celaya

*martin.medina@itcelaya.edu.mx*

***José Guadalupe Zavala Villalpando***

Tecnológico Nacional de México en Celaya

*jg.zavala@itcelaya.edu.mx*

***Arnoldo Maeda Sánchez***

Tecnológico Nacional de México en Celaya

*arnoldo.maeda@itcelaya.edu.mx*

## **Resumen**

En este artículo se estudió la estequiometría de la reacción de combustión para conocer la posibilidad de sustituir una parte del combustible doméstico, gas LP, por hidrógeno producido mediante electrólisis, HHO, para lograr una mezcla gas LP-hidrógeno con propiedades de combustión similares a las del gas licuado de petróleo y disminuir las emisiones directas de CO<sub>2</sub> desprendidas por la reacción de combustión.

Lo anterior se logró haciendo un balance de energía sobre la reacción de combustión para una temperatura adiabática de flama definida, analizando el requerimiento de aire necesario para que exista una reacción completa dependiendo de la fracción de HHO presente en la mezcla.

Con el proceso anterior se obtuvo el aire necesario para cualquier porcentaje de gas LP sustituido por HHO, el porcentaje de aire necesario como porcentaje de aire teórico dependiendo de la fracción de gas LP sustituida y la cantidad de CO<sub>2</sub> desprendida en función del HHO presente en la mezcla.

**Palabras Clave:** Combustión, estequiometría, gas LP, hidrógeno

## **Abstract**

*In this article, the stoichiometry of the combustion reaction was studied to know the possibility of replacing a part of the domestic fuel, LP, by hydrogen produced by electrolysis, HHO, to achieve an LP gas-hydrogen gas mixture with combustion properties similar to the ones of the liquefied petroleum gas and reduce the direct emissions of CO<sub>2</sub> released by the combustion reaction.*

*The above was achieved by making an energy balance over the combustion reaction for a defined flame adiabatic temperature, analyzing the air requirement for a complete reaction depending on the HHO fraction present in the mixture.*

*With the above process, the air required for any percentage of HHO-substituted LP gas was obtained, the percentage of air required as a percentage of theoretical air depending on the fraction of LP gas substituted and the amount of CO<sub>2</sub> evolved as a function of HHO present in the mixture.*

**Keywords:** Combustion, hydrogen, LP gas, stoichiometry

## **1. Introducción**

En la actualidad el gas LP es el combustible de uso doméstico más utilizado por familias mexicanas para la cocción de alimentos, calentamiento de agua, calefacción, etc. y continúa creciendo su uso [1]. En consecuencia, aumentan las emisiones directas de gases contaminantes para el medio ambiente y tóxicos para

la salud humana; que son causa de enfermedades, respiratorias principalmente [2].

Por lo anterior, es necesario reducir el gas LP como combustible para uso doméstico. Una solución a este problema es sustituir una parte del gas licuado de petróleo por hidrógeno producido por electrólisis; al lograr una mezcla entre estos gases se reducen las emisiones directas de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), en su lugar se obtiene vapor de agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), por consecuencia, las personas están expuestas a menor cantidad de elementos dañinos para su salud.

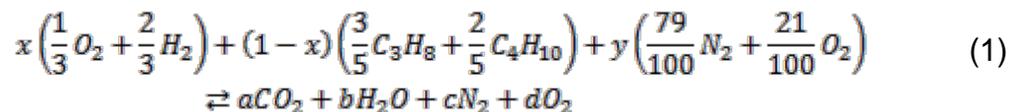
Debemos tener en cuenta que la temperatura adiabática de la flama utilizando sólo gas LP es de aproximadamente 2390 K [3], mientras que la del hidrógeno es de 3200 K [4] aproximadamente. Si se supone una mezcla entre las dos sustancias, la temperatura de la nueva mezcla está por encima de los 2390 K y debajo de los 3200 [5]. Para disminuir este número, es necesario añadir exceso de aire a la mezcla, con la finalidad de obtener unas propiedades de combustión similares a las del gas LP, y evitar daños en los electrodomésticos que utilizan este tipo de combustible.

Con el balance estequiométrico, realizado con diferentes fracciones de gas licuado de petróleo sustituido por hidrógeno, se obtuvo una primera gráfica que muestra el exceso de aire requerido para que la mezcla esté a una temperatura adiabática deseada y una segunda que nos muestra que el porcentaje de gas LP sustituido es el porcentaje de emisiones directas de gases contaminantes no liberadas al ambiente.

## 2. Métodos

Para determinar cuánto aire es requerido en la combustión de la mezcla de gas LP-hidrógeno, se supuso la combustión de mol con una fracción,  $x$ , de HHO y otra,  $1 - x$ , de gas LP, al que se le agregó  $y$  moles de aire. La cantidad de aire será más del requerido para una combustión completa, es decir, existe un exceso de aire, lo que hace considerar que, en los productos de la reacción, además de  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{N}_2$ , existe una cantidad de  $\text{O}_2$ . La reacción de lo anterior descrito se

presenta en la ecuación 1, tomando en cuenta las proporciones de los compuestos del gas LP [6].



Se propuso un valor de  $x$ , por lo tanto, se tuvieron 5 incógnitas:  $y$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$  que corresponden a la cantidad de moles de aire y a los coeficientes de los productos de la reacción respectivamente. De la conservación de las especies atómicas se obtuvieron las ecuaciones 2, 3, 4 y 5.

$$C: \frac{17}{5}(1-x) = a \Rightarrow 5a = 17 - 17x \quad (2)$$

$$H: \frac{4x}{3} + \frac{44}{5}(1-x) = 2b \Rightarrow 15b = 66 - 56x \quad (3)$$

$$O: \frac{2}{3}x + \frac{42}{100}y = 2a + b + 2d \Rightarrow 300a + 150b + 300d - 63y = 100x \quad (4)$$

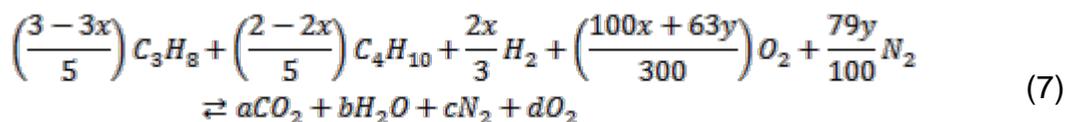
$$N: \frac{158}{100}y = 2c \Rightarrow 100c - 79y = 0 \quad (5)$$

Recordando que se tenían cinco incógnitas, entonces, hay un grado de libertad o existe una ecuación no planteada. Se definió una última ecuación empleando un balance de energía, con las mismas condiciones, y tomando como referencia la ecuación 6 [7].

$$\Delta H_p^\circ = -\Delta H^c \quad (6)$$

Donde  $\Delta H^c$  es la energía liberada por los reactivos y  $\Delta H_p^\circ$  es la energía que absorben durante el proceso.

Se partió de la ecuación balanceada, como se muestra en ecuación 7.



Ahora, se calculó la energía desprendida por la reacción de combustión siguiendo la ecuación 8, esta energía representa la diferencia entre las entalpias de los

productos y reactivos en el estado de referencia; que es el estado estándar de presión y temperatura.

$$\Delta H^{\circ} = \sum \Delta H_{f, \text{productos}}^{\circ} - \sum \Delta H_{f, \text{reactivos}}^{\circ} \quad (8)$$

Entonces, la ecuación de energía quedó como se muestra en ecuación 9.

$$\begin{aligned} \Delta H^{\circ} = & aH_{fCO_2}^{\circ} + bH_{fH_2O}^{\circ} + cH_{fN_2}^{\circ} + dH_{fO_2}^{\circ} - \left(\frac{3-3x}{5}\right)H_{fC_3H_8}^{\circ} \\ & - \left(\frac{2-2x}{5}\right)H_{fC_4H_{10}}^{\circ} - \frac{2x}{3}H_{fH_2}^{\circ} - \left(\frac{100x+63y}{300}\right)H_{fO_2}^{\circ} - \frac{79y}{100}H_{fN_2}^{\circ} \end{aligned} \quad (9)$$

Considerando que, en el estado de referencia, las entalpías de formación de los elementos son cero, la ecuación (9) se redujo a la ecuación 10.

$$\Delta H^{\circ} = aH_{fCO_2}^{\circ} + bH_{fH_2O}^{\circ} + \left(\frac{3x-3}{5}\right)H_{fC_3H_8}^{\circ} + \left(\frac{2x-2}{5}\right)H_{fC_4H_{10}}^{\circ} \quad (10)$$

Después, se calculó el calor que debe ser absorbido por los productos para incrementar su temperatura según la ecuación 11.

$$\Delta H_p^{\circ} = \sum m_i R \int_{T_0}^T \frac{C_{p,i}^{\circ}}{R} dT \quad (11)$$

Donde  $C_{p,i}^{\circ}$  es propio de cada uno de los productos y  $m_i$  es el coeficiente de perteneciente a cada producto en la ecuación balanceada para la cual se evalúa  $\Delta H^{\circ}$ ,  $T_0$  es la temperatura del estado de referencia para el cual se evalúa  $\Delta H^{\circ}$  y  $T$  es la temperatura adiabática de la flama.

Se pudo calcular la relación de calores específicos y constante del gas a partir de la ecuación 12.

$$\frac{C_p^{\circ}}{R} = A + BT + CT^2 + DT^{-2} \quad (12)$$

Donde A, B, C y D son propios de cada reactivo, como se muestra en la tabla 1.

Siguiendo la ecuación 11 se dedujo la ecuación 13.

$$\Delta H_p^{\circ} = R \left[ c_1(T_{ad} - T_0) + c_2(T_{ad}^2 - T_0^2) + c_3(T_{ad}^3 - T_0^3) - c_4 \frac{1}{T_{ad}} + c_4 \frac{1}{T_0} \right] \quad (13)$$

Tabla 1 Constantes de los gases [7].

	R (J/mol-K)	Hf (J/mol)	A	B	D	ΔS (J/K)
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	8.314	-104680	-	-	-	-
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	8.314	-125790	-	-	-	-
H <sub>2</sub>	8.314	0	-	-	-	130.68
O <sub>2</sub>	8.314	0	3.63964	0.0005060005	-22700	205.14
N <sub>2</sub>	8.314	0	3.28	0.0005930006	4000	-
CO <sub>2</sub>	8.314	-393509	5.45746	0.001045001	-	-
H <sub>2</sub> O(g)	8.314	-241818	3.47	0.001450015	12100	-
H <sub>2</sub> O(l)	-	-285830	-	-	-	69.91

Con:

$$c_1 = \sum_{i=1}^m n_i A_i$$

$$c_2 = \sum_{i=1}^m \frac{n_i B_i}{2}$$

$$c_3 = \sum_{i=1}^m \frac{n_i C_i}{3}$$

$$c_4 = \sum_{i=1}^m n_i D_i$$

En este caso, la temperatura que se quiere alcanzar en la flama se propone, de modo que,  $T_{ad}$  es conocida; entonces, tomando en cuenta dicha consideración, la ecuación 13 quedó como se muestra en ecuación 14.

$$\begin{aligned} \Delta H_P^f = R & \left[ (aA_{CO_2} + bA_{H_2O} + cA_{N_2} + dA_{O_2})(T_{ad} - T_0) \right. \\ & + (aB_{CO_2} + bB_{H_2O} + cB_{N_2} + dB_{O_2}) \frac{(T_{ad}^2 - T_0^2)}{2} \\ & - (aD_{CO_2} + bD_{H_2O} + cD_{N_2} + dD_{O_2}) \frac{1}{T_{ad}} \\ & \left. + (aD_{CO_2} + bD_{H_2O} + cD_{N_2} + dD_{O_2}) \frac{1}{T_0} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

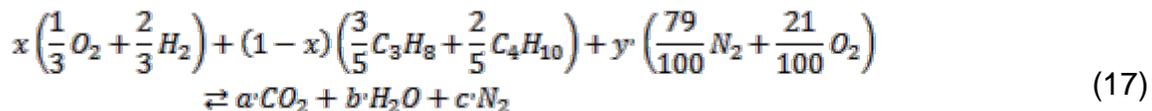
Declarando que,  $Q_i^P = R \left( A_i(T_{ad} - T_0) + B_i \frac{(T_{ad}^2 - T_0^2)}{2} - D_i \frac{1}{T_{ad}} + D_i \frac{1}{T_0} \right)$  para cada producto, entonces de factorizar para a, b, c y d en la ecuación (14) resultó la ecuación 15.

$$\Delta H_P^s = aQ_{CO_2}^P + bQ_{H_2O}^P + cQ_{N_2}^P + dQ_{O_2}^P \quad (15)$$

Finalmente, se igualaron las dos cantidades de calor obtenidas según ecuación 6; obteniéndose la quinta ecuación que hizo posible resolver el sistema representado por ecuación 16.

$$a \left( Q_{CO_2}^P + H_{fCO_2}^s \right) + b \left( Q_{H_2O}^P + H_{fH_2O}^s \right) + cQ_{N_2}^P + dQ_{O_2}^P = \left( \frac{3-3x}{5} \right) H_{fC_3H_8}^s + \left( \frac{2-2x}{5} \right) I \quad (16)$$

En la ecuación (1)  $y$  indica el número de moles de aire presentes por cada mol de mezcla gas LP-HHO, pero esta cantidad tiene que expresarse como porcentaje del aire teórico, por lo que, una vez obtenido el valor de  $y$  se procedió a obtener la cantidad de moles de aire necesarios por cada mol de la mezcla para que se consuma todo el oxígeno en la reacción; se necesitó plantear nuevamente una ecuación para la reacción con la diferencia de que no existe oxígeno en los productos. Denotando como  $y, a', b'$  y  $c'$  a los coeficientes del aire y los productos, respectivamente, resultó la ecuación 17.



El valor de  $x$  debe ser el mismo que el usado en la ecuación planteada con exceso de aire pues este valor caracteriza a la mezcla.

De la conservación de especies atómicas se obtuvieron las ecuaciones necesarias para encontrar las variables, ecuaciones 18 a 21.

$$C: \frac{17}{5} (1-x) = a' \Rightarrow 5a' = 17 - 17x \quad (18)$$

$$H: \frac{4x}{3} + \frac{44}{5} (1-x) = 2b' \Rightarrow 15b' = 66 - 56x \quad (19)$$

$$O: \frac{2}{3}x + \frac{42}{100}y' = 2a' + b' \Rightarrow 300a' + 150b' - 63y' = 100x \quad (20)$$

$$N: \frac{158}{100}y' = 2c' \Rightarrow 100c' - 79y' = 0 \quad (21)$$

Una vez obtenido  $y$  se puede expresar el aire necesario para conseguir la temperatura adiabática deseada, como un porcentaje del aire teórico, aplicando la ecuación 22.

$$\text{aire como porcentaje de aire teórico} = \frac{y}{y'} 100 \quad (22)$$

Con todo lo anterior, se fueron dando distintos valores a la fracción  $x$  y se consiguió una curva que relaciona la composición de la mezcla con el aire requerido para su combustión se se espera una temperatura teórica establecida.

Una vez sustituido una parte del gas LP por el HHO, es evidente que las emisiones directas producidas por la reacción de combustión disminuyeron debido a que, la cantidad de dióxido de carbono desprendida depende sólo de la fracción  $1-x$  y no del exceso de aire, por lo tanto, el coeficiente  $y$  de como el de  $y'$  proporcionan la cantidad de moles de este gas por mol de mezcla en la reacción. Se calculó este valor, despejando  $a$  de la ecuación 2, como se muestra en ecuación 23.

$$a = \frac{17 - 17x}{5} \quad (23)$$

### 3. Resultados

Se definió la cantidad de aire que debe agregarse a la mezcla dependiendo la fracción de HHO por mol de mezcla, para una fracción cualquiera, manteniendo la temperatura adiabática de la flama a 550 °C [8], expresado en moles por mezcla; en la figura 1 se muestra la gráfica obtenida, que representa la cantidad de aire requerido en función de la fracción de HHO expresada como porcentaje.

En la figura 1 se puede observar que, a medida que el porcentaje de HHO incrementaba, la cantidad del aire disminuía, puesto que, el HHO no requiere

oxígeno adicional para su combustión completa y el aire que se adiciona tiene la única función de absorber el calor de la reacción, con la finalidad de que la temperatura adiabática bajara. Específicamente, para los casos en los que se utilice una estufa, un calentador o ambos electrodomésticos al mismo tiempo, las cantidades de moles son 62.37, 82.16 y 98.78 respectivamente.

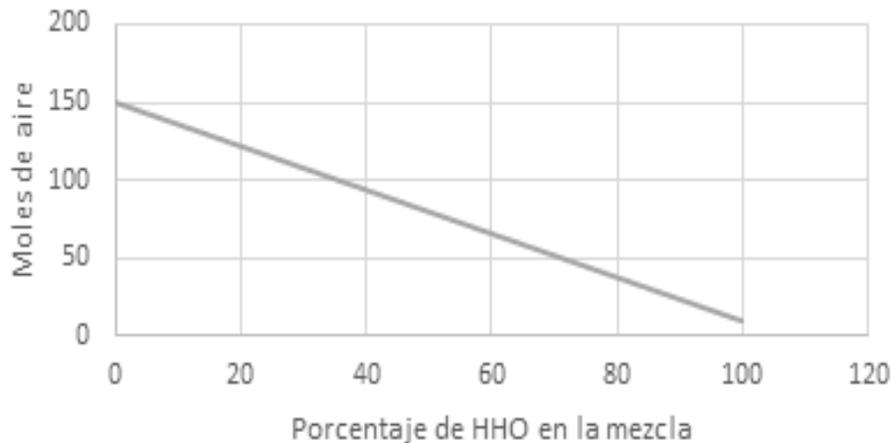


Figura 1 Número de moles de aire requerido respecto al porcentaje de HHO en la mezcla.

Por otra parte, el aire requerido expresado como porcentaje de aire teórico se muestra en la figura 2, tal valor tendió al infinito para valores de contenido de HHO cercanos al 100%, esto debido a que el aire teórico para esos casos se aproxima a cero.

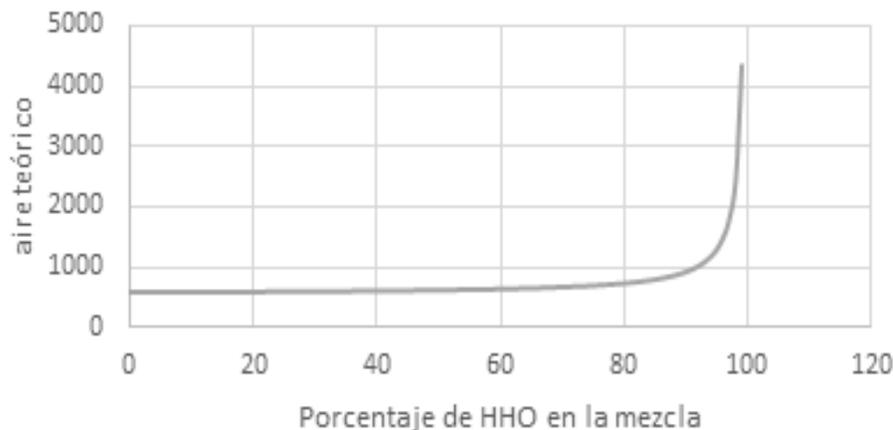


Figura 2 Aire requerido en porcentaje de aire teórico respecto al porcentaje de HHO.

Se encontró que la disminución de  $\text{CO}_2$  es directamente proporcional a la cantidad de HHO presente en la mezcla, lo que implica que, a mayor adición de HHO al gas LP, menor es la contaminación producida por la combustión (ver figura 3); las emisiones de  $\text{CO}_2$  disminuyen de 3.4 moles por mol de gas LP, a 1.26, 1.74 y 2.14 moles por mol de mezcla para cuando el sistema se utiliza para una estufa, un calentador o ambos dispositivos respectivamente.

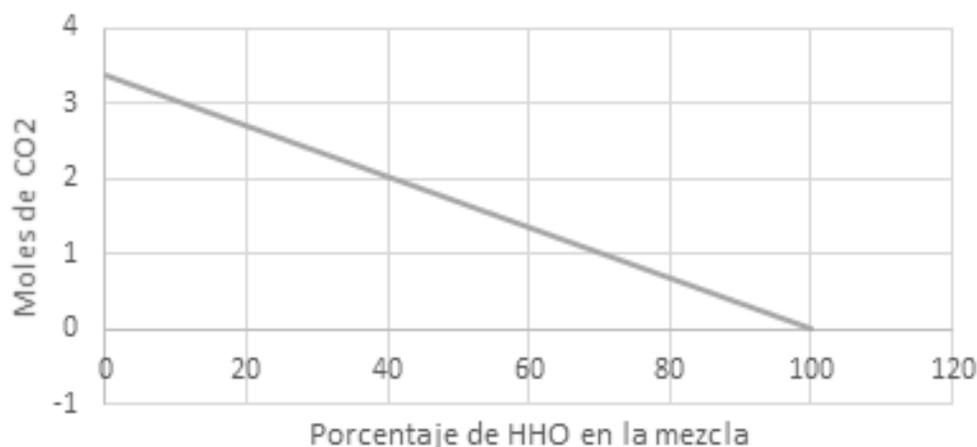


Figura 3 Moles de  $\text{CO}_2$  producidos por mol de mezcla en función del porcentaje de HHO.

#### 4. Discusión

Es posible conseguir una temperatura deseada en la mezcla de gas LP-HHO variando el aire presente durante la reacción de combustión. Se puede concluir que, a mayor presencia de HHO en la mezcla, disminuye la cantidad de aire necesario para llevar a cabo una reacción de combustión completa porque el hidrógeno ya contiene el oxígeno que requiere. Además, la existencia de una mayor cantidad de este compuesto es directamente proporcional a la reducción del dióxido de carbono producido de la reacción de combustión de la mezcla.

Otro aspecto importante a analizar, es que, una vez logrado el estudio estequiométrico, es necesario realizar pruebas para demostrar que es seguro el uso de esta mezcla como combustible doméstico, dado la propiedad de alta explosividad presente en el hidrógeno.

## 5. Bibliografía y Referencias

- [1] SENER (Secretaría de Energía), (2016), Prospectiva de Gas LP 2016-2030, [http://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/177623/Prospectiva\\_de\\_Gas\\_LP.pdf](http://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/177623/Prospectiva_de_Gas_LP.pdf).
- [2] IMCO (Instituto Mexicano para la Competitividad A.C.), (2010), Calidad del Aire, Sitio web: <http://imco.org.mx/calculadora-aire/>
- [3] Ramírez, J. C., (2006), Caracterización de Llamas mediante Termometría de Doble Longitud de Onda e Interferometría de Desplazamiento Lateral, <http://biblioteca.cio.mx/tesis/11446.pdf>
- [4] Sánchez, M., (2009), Combustión en MEMS, <http://webserver.dmt.upm.es/mems/people/files/Intro.pdf>.
- [5] Choudhuri, A. Gollahalli, S. & Mallinson, R. Combustion Characteristics Of Hydrogen-Propane Mixtures. Symposium: Combustion Chemistry Of Traditional And Non-Traditional Fuels: by the ACS Division of Energy & Fuels. 1998 Spring Dallas.
- [6] Hoja de Datos de Seguridad para Sustancias Químicas Gas Licuado del Petróleo, [http://www.gas.pemex.com.mx/NR/rdonlyres/D3D851A9-FDE6-4F68-8FD1-3CC6E50163E4/0/HojaSeguridadGasLP\\_v2007.pdf](http://www.gas.pemex.com.mx/NR/rdonlyres/D3D851A9-FDE6-4F68-8FD1-3CC6E50163E4/0/HojaSeguridadGasLP_v2007.pdf)
- [7] Smith, J., Van Ness, H. & Abbot, M., (2007), Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química. México, D. F. McGraw-Hill
- [8] NOM-010-SESH-2012, (2013), Diario Oficial de la Federación, Ciudad de México, México, [http://www.dof.gob.mx/nota\\_detalle.php?codigo=5300565&fecha=29/05/2013](http://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5300565&fecha=29/05/2013).