

MODELADO COMPUTACIONAL DE LA COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE HIDRÓGENO VERDE E HIDROCARBUROS PARA SU EVALUACIÓN ENERGÉTICA Y DE EMISIONES DE CO₂

COMPUTATIONAL SIMULATION OF THE COMBUSTION OF GREEN HYDROGEN – HYDROCARBONS MIXTURES FOR ENERGY PERFORMANCE AND CARBON DIOXIDE EMISSIONS

Matías Andrés Carrión-Salazar¹, Daniel Felipe Sempértégui-Tapia² y Cristian Chávez-Toro^{1,*}

¹*Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad de La Serena, La Serena, Chile*

²*Laboratorio de Energías Alternativas (LEA), Universidad Privada Boliviana (UPB), Cochabamba, Bolivia*
cchavez@userena.cl

(Recibido el 15 de junio 2025, aceptado para publicación el 30 de julio 2025)

RESUMEN

Bolivia, al igual que otros países en desarrollo, enfrenta el reto de reducir su dependencia de combustibles fósiles y avanzar hacia una matriz energética más limpia. En este contexto, el hidrógeno verde surge como una alternativa viable, aunque su implementación aún requiere investigación local. Países como Chile ya han dado pasos importantes mediante políticas como la Estrategia Nacional del Hidrógeno Verde, que promueve su uso en diversas aplicaciones, incluyendo la combustión. Este trabajo se enmarca en esa línea de desarrollo, presentando el modelado computacional de la combustión de mezclas de hidrógeno verde con cuatro hidrocarburos: metano, gas licuado de petróleo (GLP), octano y etanol. Para esto, se desarrolla un código en Python para estimar propiedades fisicoquímicas a lo largo del rango de mezclas, las cuales se integran en simulaciones termodinámicas en OpenModelica, utilizando la biblioteca ThermoSysPro. Posteriormente, los resultados son procesados mediante otro código en Python, permitiendo analizar fracciones másicas de productos de combustión en condiciones estequiométricas con exceso de 10% de aire, el grado de descarbonización en función de la fracción y flujo másico de hidrógeno, la energía generada con y sin considerar pérdidas térmicas, los poderes caloríficos superior e inferior (PCS y PCI), y el índice de Wobbe en los casos de metano y GLP. Los resultados muestran que la descarbonización depende directamente del contenido de carbono del hidrocarburo base, y que la adición de hidrógeno incrementa la energía generada por unidad de masa, reforzando su potencial como vector energético en la transición hacia sistemas más sostenibles.

Palabras Clave: Hidrogeno verde, Combustión, Evaluación energética, Emisiones de CO₂

ABSTRACT

Bolivia, like other developing countries, faces the challenge of reducing its dependence on fossil fuels and moving toward a cleaner energy matrix. In this context, green hydrogen emerges as a viable alternative, although its implementation still requires local research. Countries such as Chile have already taken significant steps through policies like the National Green Hydrogen Strategy, which promotes its use in various applications, including combustion. This work aligns with that line of development by presenting the computational modeling of the combustion of green hydrogen blended with four selected hydrocarbons: methane, liquefied petroleum gas (LPG), octane, and ethanol. For this purpose, a Python code was developed to estimate the physicochemical properties across the entire range of mixtures, which are then integrated into thermodynamic simulations performed in OpenModelica using the ThermoSysPro library. Subsequently, the results are processed using another Python code, enabling the analysis of mass fractions of combustion products under stoichiometric conditions with a 10% excess of air, the degree of decarbonization as a function of hydrogen mass fraction and flow rate, the energy generated with and without accounting for thermal losses, the higher and lower heating values (HHV and LHV), and the Wobbe index in the cases of methane and LPG. The results show that decarbonization depends directly on the carbon content of the base hydrocarbon, and that the addition of hydrogen increases the energy generated per unit mass, reinforcing its potential as an energy vector in the transition toward more sustainable systems.

Keywords: Green hydrogen, Combustion, Energy performance, Carbon dioxide emissions

1. INTRODUCCIÓN

El calentamiento global es un problema medioambiental internacional impulsado, principalmente, por el aumento en las concentraciones de los gases de efecto invernadero (GEI), especialmente el dióxido de carbono (CO₂). Aunque estos gases cumplen una función natural y necesaria en la atmósfera al actuar como una “frazada” que permite la retención del calor, se convierten en una amenaza cuando sus concentraciones exceden los límites naturales, generando un incremento sostenido de la temperatura media del planeta. Según Barra y Gallardo [1], una duplicación de los GEI podría elevar la temperatura entre 1 y 3,5 °C, un cambio comparable, aunque en dirección inversa, al que desencadenó la última glaciación.

La principal causa del aumento de CO_2 es la combustión de combustibles fósiles como el carbón, petróleo y gas natural. Esta problemática ha impulsado la búsqueda de soluciones energéticas más limpias, entre las que destaca el hidrógeno verde. Este vector energético, al combustionar, genera únicamente vapor de agua y calor [2], sin emisiones de carbono. Reconociendo este potencial, algunos países han comenzado a implementar estrategias específicas; por ejemplo, Chile ha establecido una Estrategia Nacional del Hidrógeno Verde con miras a 2040, basada en su capacidad para aprovechar fuentes renovables como la solar, eólica e hidráulica. Sin embargo, en muchos otros contextos, la infraestructura y políticas necesarias para la producción masiva de hidrógeno verde aún están en desarrollo.

En este marco, la incorporación de hidrógeno en mezclas combustibles con hidrocarburos tradicionales ha emergido como una estrategia viable de transición hacia sistemas energéticos más sostenibles. Diversos estudios, han demostrado que el enriquecimiento con hidrógeno no solo incrementa la velocidad de propagación de la llama y amplía los límites de inflamabilidad, sino que también reduce significativamente las emisiones de CO_2 y CO [3][4]. No obstante, este efecto suele ir acompañado de un aumento en las emisiones de NO_x debido al incremento de la temperatura de la llama. Ishaq y Dincer [5] evidenciaron que el hidrógeno mejora la eficiencia térmica, aunque requiere un control preciso para evitar inestabilidades térmicas.

Simulaciones numéricas realizadas por Breer et al. [6], para mezclas de hidrógeno/metano, mostraron que el hidrógeno produce llamas más cortas, calientes y rápidas, aunque tiene mayor sensibilidad en las emisiones de NO_x . En condiciones de combustión tipo mild, Ali et al. [7] observaron que el hidrógeno estabiliza la llama en mezclas ultra magras, pero puede intensificar la formación de óxidos de nitrógeno. Por otro lado, en configuraciones tipo swirl, Rahman et al. [8] reportaron que proporciones moderadas de H_2 (~30%) permiten reducir las emisiones de CO y CO_2 manteniendo la estabilidad de la llama. Bayramoğlu et al. [9], al analizar mezclas ternarias $\text{CH}_4\text{--NH}_3\text{--H}_2$, encontraron que el H_2 actúa como catalizador de ignición del amoníaco, mejorando la eficiencia del proceso y reduciendo los tiempos de retardo de encendido. Más recientemente, Rashid et al. [10] realizaron simulaciones CFD en llamas laminares de etileno, propano y tolueno enriquecidas con mezclas de NH_3 y H_2 en proporciones de hasta el 50%, evidenciando reducciones de hasta un 97% en hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH) y un 63% en emisiones de NO , manteniendo temperaturas efectivas de combustión (~1500 - 1768 K). Además, se observó que el H_2 es más eficaz en la reducción de CO , mientras que el NH_3 sobresale en la supresión de N_2O y formaldehído. Wang et al. [11] refuerzan estas conclusiones al señalar que la mezcla dual $\text{NH}_3\text{--H}_2$ representa una alternativa viable para una combustión limpia, libre de carbono y adaptable a tecnologías convencionales.

En este contexto, el presente trabajo se enfoca en el estudio computacional de la combustión de mezclas de hidrógeno con distintos hidrocarburos (metano, gas licuado, octano y etanol) mediante el uso del software OpenModelica. El objetivo principal es desarrollar una herramienta de modelado que permita estimar propiedades relevantes de los productos de combustión, como la reducción de emisiones, la energía generada, la relación $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ y parámetros clave como el índice de Wobbe, en función del porcentaje de hidrógeno incorporado. El análisis se fundamenta en la variación de propiedades físico-químicas derivadas de la alteración de la composición de la mezcla, y su impacto sobre la energía liberada y los productos generados.

Cabe señalar que este estudio se centra exclusivamente en los efectos termoquímicos derivados de la adición progresiva de hidrógeno en mezclas con hidrocarburos, evaluando variables como la temperatura de llama, la entalpía de formación, las emisiones de CO_2 y el índice energético. Se emplea modelación numérica basada en mecanismos detallados de equilibrio químico y herramientas de código abierto, sin abordar aspectos relacionados con la producción, almacenamiento o transporte del hidrógeno, ni su análisis económico o hídrico. De este modo, el trabajo contribuye al entendimiento del comportamiento de mezclas enriquecidas con hidrógeno bajo condiciones controladas, como paso previo hacia una implementación más amplia de tecnologías de combustión bajas en carbono.

2. METODOLOGÍA

La presente sección describe el enfoque metodológico seguido para modelar y analizar la combustión de mezclas de hidrógeno con distintos hidrocarburos. Se detallan las ecuaciones de gobierno empleadas, el cálculo de propiedades físicoquímicas relevantes, el desarrollo del modelo computacional en el entorno OpenModelica y, finalmente, las técnicas aplicadas para el post-procesamiento y análisis de los resultados obtenidos.

2.1. Ecuaciones de gobierno

A continuación, se presentan las ecuaciones particulares que hacen mención al problema desarrollado y forman parte de las ecuaciones que gobiernan la biblioteca del ThermoSysPro¹, como ser el balance de masa, el balance de energía, la pérdida de presión, fracción de masa e índice de Wobbe.

¹ <https://gitlab.pam-ret.d.fr/thermosysproandco/ThermoSysPro>

Balance de masa

El balance de masa queda en términos del $\dot{m}_a$, correspondiente al flujo másico de aire ingresando al sistema y a $\dot{m}_f$, que representa el flujo másico de combustible, entre los dos se obtiene el flujo másico de los gases o productos de la combustión $\dot{m}_g$, tal como se aprecia en la ecuación (1).

$$\dot{m}_g = \dot{m}_a + \dot{m}_f \quad (1)$$

Balance de energía en sistemas reactivos

A diferencia de la ecuación del balance de energía tradicional, la biblioteca de ThermoSysPro toma otro camino al considerar de manera diferente el problema, en la ecuación (2):

$$(\dot{m}_a + \dot{m}_f)h_{g,o} + W_l + W_s = \dot{m}_f(h_f + PCI) + \dot{m}_a h_a \quad (2)$$

Donde el valor de $h_{g,o}$ representa la entalpía de los productos de la combustión (J/kg); W_l es la pérdida de poder térmico (W); W_s es la energía térmica intercambiada entre los gases de combustión y el sistema, que equivale a la suma del calor de convección y radiación, medida en W; donde además, h_f y h_a son las entalpías en la entrada del combustible y el aire, correspondientemente, en J/kg; y por último, PCI es el poder calorífico inferior en J/kg.

Cálculo de la pérdida de presión

El sistema considera pérdidas de presión entre la entrada y la salida, tal como se aprecia en la siguiente ecuación:

$$P_o = P_i - \Lambda \frac{\rho_m V^2}{2} \quad (3)$$

Donde P_o y P_i representa la presión de entrada y salida, respectivamente, en Pa, siendo el término Λ el coeficiente de pérdida de presión en el sistema en m^{-4} ; ρ_m la densidad promedio del fluido en kg/m^3 y V la velocidad de los gases o productos de la combustión en m/s.

Fracción de masa de los productos de combustión

La fracción de masa de los productos se calcula a través de cálculos estequiométricos simples en la ecuación de la reacción. Para la fracción de CO_2 , por ejemplo, se utiliza la relación la masa del combustible con respecto a la masa de los productos de la combustión, la fracción de masa de carbono en el combustible $X_{C,f}$ y la relación de pesos moleculares entre el CO_2 el carbono como mostrado en la ecuación (4):

$$X_{CO_2} = \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a} X_{C,f} \frac{M_{CO_2}}{M_C} \quad (4)$$

De manera análoga, según las ecuaciones (5) y (6), se puede determinar la fracción másica de agua y el oxígeno en los gases de producción:

$$X_{H_2O} = \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a} X_{H,f} \frac{M_{H_2O}}{M_H} \quad (5)$$

$$X_{O_2} = \frac{\dot{m}_a}{\dot{m}_g} X_{O_2,a} - M_o \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a} \left(\frac{2X_{C,f}}{M_C} + \frac{X_{H,f}}{2M_H} \right) \quad (6)$$

Índice de Wobbe

El índice de Wobbe, propuesto por [12], es un parámetro fundamental para evaluar la intercambiabilidad de gases combustibles en sistemas térmicos, ya que relaciona el poder calorífico volumétrico con la densidad del gas, y permite estimar si una mezcla puede ser utilizada sin requerir modificaciones significativas en quemadores o redes de distribución. En general, se acepta que una variación del $\pm 5\%$ respecto al valor original del gas base garantiza la compatibilidad operativa del sistema. Su cálculo puede ser realizado a través de la ecuación (7):

$$W = \frac{PCS}{\sqrt{\frac{\rho_{gas}}{\rho_{aire}}}} \quad (7)$$

Donde PCS corresponde al poder calorífico superior, y, ρ_{gas} y ρ_{aire} , corresponden a la densidad del gas y del aire a mismas condiciones de presión y temperatura, respectivamente.

2.2. Cálculo de propiedades fisicoquímicas

El objetivo de esta etapa es determinar las propiedades físico-químicas de cuatro hidrocarburos comerciales seleccionados para el estudio: gas natural (modelado como metano), gas licuado de petróleo (considerado como una mezcla de 80% propano y 20% butano), gasolina (representada como n-octano) y etanol (único alcohol analizado).

El código desarrollado en esta etapa de pre-procesamiento fue diseñado para admitir la modificación de propiedades iniciales de manera flexible, permitiendo el cambio del hidrocarburo en estudio.

Una vez definidos los parámetros iniciales se procede con el cálculo de dos propiedades clave: la densidad y el calor específico. La densidad se determina empleando el modelo homogéneo, mientras que el calor específico se obtiene utilizando la expresión propuesta por Cicchitti et al. [13], adecuada para mezclas de gases. Dado que se trabaja con mezclas binarias de hidrógeno e hidrocarburo, se incorpora un factor de calidad modificado en las ecuaciones, proporcional a la fracción másica del hidrocarburo en la mezcla, con valores que varían entre 0 (mezcla compuesta solo por hidrógeno) y 1 (solo hidrocarburo).

Para la estimación de propiedades en mezclas no reactivas, se utiliza la ley de presiones parciales. En este enfoque, se calcula la presión parcial de cada componente (hidrógeno e hidrocarburo) a partir de su fracción molar, y luego se determina la propiedad deseada a partir de estas presiones. Este procedimiento se repite en intervalos del 5%, abarcando el rango completo de mezclas desde 0% hasta 100% de hidrógeno.

El cálculo del poder calorífico inferior (PCI) se realiza a partir de un balance estequiométrico basado en una reacción ideal de combustión completa, en la cual todo el oxígeno se transforma en dióxido de carbono, sin formación de monóxido de carbono [14]. Esta hipótesis se ajusta adecuadamente a las condiciones simuladas, ya que se trabaja con exceso de aire y no se contempla generación de CO.

Finalmente, para introducir adecuadamente las propiedades del combustible en el modelo, es necesario calcular las fracciones másicas de carbono, hidrógeno y oxígeno presentes en cada mezcla. Esto se realiza en función de los moles de cada elemento presentes tanto en el hidrógeno como en el hidrocarburo seleccionado. A partir de estos datos se determina la masa de cada elemento, la masa total del combustible y, con ello, las fracciones másicas correspondientes.

2.3. Simulación en OpenModelica

Para la simulación computacional se utilizaron datos de la cámara de combustión utilizadas por Copete et al. [15]. Además, se utilizó un exceso de aire del 10%, esto para garantizar la combustión completa de los hidrocarburos y evitar la posibilidad de formación de sustancias nocivas como el monóxido de carbono. Asimismo, la temperatura del combustible se fija en 25 °C y 150 kPa de presión. El resto de los parámetros empleados en la simulación se encuentran detallados en la Tabla 1.

TABLA 1: PARÁMETROS EMPLEADOS EN LA SIMULACIÓN

Parámetro	Valor	Descripción
P0	150 kPa	Presión de Combustible
Q0	0.00126 kg/s	Flujo Másico de Combustible
T0	25 °C	Temperatura de Combustible
P0	100 kPa	Presión de Aire
Exc	10% (1.1*ath)	Relación de Aire
T0	1058 K	Temperatura de Entrada
Acham	8.0384 m ²	Área promedio de la cámara
Kex	10 W/m ² K	Coefficiente de convección
EPSPAR	0.7	Emisividad de la cámara
W0	741 °C	Fuente de Calor (Activo=2)
option_temperature	2	1: Temperatura fija - 2: Flujo de Calor Fijo

Adicionalmente, se considera como hipótesis que el combustible no tiene humedad y que la temperatura en las paredes de la cámara es de 741°C, debido a que para este valor se alcanza una potencia generada de 60000 W con la combustión del metano.

En la Figura 1, se presenta el diagrama de la simulación desarrollada en OpenModelica. En esta se ve la cámara de combustión como el componente central, ya que es la encargada de representar el proceso físico-químico de la combustión y resolver las ecuaciones asociadas. Este componente cuenta con cinco conectores funcionales, los cuales permiten la interacción con otros elementos del sistema simulado. A continuación, se describen sus funciones específicas:

1. **Fuel Inlet:** Este conector recibe la entrada del combustible, ya sea en estado sólido, líquido o gaseoso. Es esencial que el componente conectado a esta entrada proporcione todas las propiedades termodinámicas y composicionales necesarias para la simulación del proceso de combustión.
2. **Air Inlet:** Este conector se emplea para vincular un componente de entrada de aire, que debe contener información detallada sobre su composición y propiedades físicas.
3. **Water/Steam Inlet:** Permite la conexión de un flujo de agua, utilizado como medio de enfriamiento si la configuración lo requiere. Incluso en los casos en que no se utiliza refrigeración activa, este conector debe estar vinculado para mantener el equilibrio en las ecuaciones de simulación y evitar errores numéricos.
4. **Flue Gases Outlet:** A través de este conector se extraen los productos de combustión. Su inclusión es necesaria para cerrar el balance de masa y energía, así como para permitir el análisis de las emisiones generadas.
5. **Thermal Port:** Este puerto permite acoplar componentes térmicos adicionales que aprovechen el calor generado durante la combustión. A través de él se pueden incorporar subsistemas que simulen, por ejemplo, ciclos termodinámicos de aprovechamiento energético, como Rankine o Brayton.

Esta configuración modular y paramétrica de la cámara de combustión permite una integración flexible con otros elementos del modelo y facilita la simulación de distintos escenarios operativos, optimizando así el análisis comparativo entre distintas mezclas combustibles.

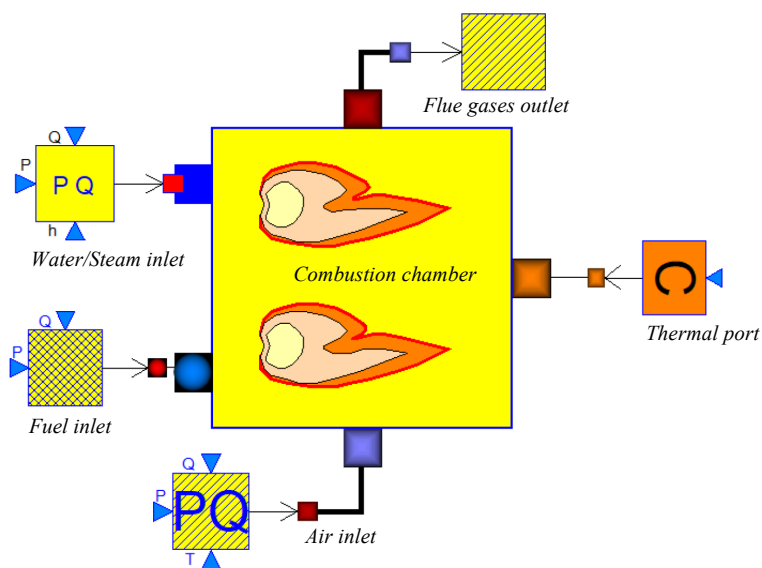


Figura 1: Diagrama del modelo de estudio de OpenModelica.

La simulación del proceso de combustión se debe realizar 20 veces por cada uno de los cuatro hidrocarburos para realizar el estudio completo de la mezcla con aumentos del 5% de hidrógeno hasta alcanzar la totalidad del mismo, para esto, se utiliza la tolerancia de 1×10^{-5} y el algoritmo DASSL alojado en el software de cómputo. Los resultados obtenidos son almacenados en un documento Excel para su post-procesado, en el que, de todas las propiedades que entrega OpenModelica, se registran el % H_2 , flujo de gases de combustión, temperatura de gases, entalpía de gases de combustión, fracciones másicas de todos los productos, intercambio energético y flujo másico de CO_2 .

2.4. Post-procesamiento de datos

En esta sección, los datos obtenidos y almacenados en Excel son post-procesados, por medio, de un código en Python, en el que, por medio del uso de un DataFrame se puede obtener propiedades o resultados que sean de mayor interés para este estudio, que son la energía generada durante el proceso de combustión, las emisiones de contaminantes de CO_2 , conocer el poder calorífico superior e inferior, y determinar el índice de Wobbe para el metano y el GLP.

La reducción de emisiones de dióxido de carbono son resultado de la propia simulación en su forma de fracción másica. Este valor representa la fracción del flujo másico de combustible que se convirtió en CO_2 , por ende, al multiplicar ambos valores, se obtiene las emisiones en términos másicos de este gas, lo que, a su vez, permite conocer los porcentajes de descarbonización que se generan al aumentar la cantidad de hidrógeno en la mezcla, del mismo modo, el uso de la fracción másica por sí misma entrega información similar, pero que puede ser analizada de manera diferente.

El segundo punto importante, es la obtención de la energía generada por el proceso, la simulación en OpenModelica entrega un valor de esta propiedad, sin embargo, ese resultado incluye las pérdidas mínimas que se producen por efecto de las paredes de la cámara de combustión, lo que vuelve de interés el poder conocer el valor real de la energía, sin incluir estos valores disipativos. Para realizar esto, se debe llevar a cabo, un balance de energía completo, para el que, se debe conocer los moles de cada elemento y las entalpías a la temperatura de referencia y de operación. En este proceso, los cálculos de entalpía se realizan por medio de la librería CoolProp [16], en el que, los estados de referencia se utilizan a una presión de 1 atm y una temperatura de 298,15 K, y, por otro lado; los estados de operación corresponden a 25°C, para la mezcla combustible; 1058 K, para el aire de entrada; y la temperatura de los productos es variable, según los obtenidos por la propiedad T_{prod} .

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos a partir de la simulación computacional de la combustión de mezclas de hidrógeno con diferentes hidrocarburos. El análisis se organiza en función de cuatro aspectos clave: la distribución de fracciones másicas de los productos de combustión, las emisiones de CO_2 generadas, la energía liberada durante el proceso, y la variación del índice de Wobbe según la proporción de hidrógeno incorporada. Los resultados permiten evaluar el impacto termoquímico y ambiental de cada mezcla, así como su viabilidad técnica en aplicaciones energéticas.

3.1. Fracciones másicas de los gases de combustión

El análisis de las fracciones másicas de los productos de combustión permite evaluar el potencial de descarbonización de diferentes hidrocarburos al ser mezclados con hidrógeno, al mismo tiempo que se mantiene la condición de exceso de aire constante (relación aire-combustible fija). Bajo este supuesto, las fracciones de oxígeno y nitrógeno en los productos de combustión permanecen prácticamente invariables, lo cual permite centrar el análisis en la evolución del dióxido de carbono (CO_2) y del vapor de agua (H_2O), productos primarios de la oxidación del carbono y del hidrógeno, respectivamente. La Figura 2 ilustra la variación de estas fracciones másicas para los cuatro combustibles con el incremento de la fracción de H_2 .

El metano, con una única unidad de carbono por molécula, presenta una respuesta rápida a la inclusión de hidrógeno. El punto de cruce, en el cual la fracción másica de vapor de agua supera a la de CO_2 , ocurre a partir de una concentración de 30–35% de hidrógeno en la mezcla. A partir de esta proporción, la tendencia se acentúa hasta alcanzar una fracción másica máxima de H_2O de 0,2324 en el caso de combustión completa de hidrógeno puro. Esta rápida transición se explica por el bajo contenido de carbono del metano y su alta proporción de hidrógeno relativa.

El octano representa el caso opuesto. Con ocho átomos de carbono, su combustión produce un volumen significativamente mayor de dióxido de carbono en comparación con agua, lo que genera una respuesta mucho más lenta ante la adición de hidrógeno. Para que la fracción másica de H_2O supere al CO_2 , se requiere una mezcla con más del 90% de hidrógeno, lo que indica una baja sensibilidad del octano frente a procesos de descarbonización parcial. A mezclas más moderadas (por ejemplo, 30%), las variaciones en las fracciones de CO_2 y H_2O son mínimas.

El GLP, compuesto por una mezcla de propano (80%) y butano (20%), presenta un comportamiento intermedio. Con un número medio de átomos de carbono entre 3 y 4 por molécula, su perfil de fracciones másicas evoluciona de forma gradual. El cruce entre el vapor de agua y el dióxido de carbono se produce aproximadamente al 80% de hidrógeno en la mezcla. Hasta un 50% de adición de hidrógeno, los cambios en las fracciones másicas son leves; sin embargo, posteriormente se acelera la reducción de CO_2 , alcanzando al 100% de hidrógeno las mismas condiciones límite que en los otros casos.

El etanol, con dos átomos de carbono por molécula y un grupo hidroxilo en su estructura, muestra un comportamiento más similar al del metano. Gracias a su menor contenido de carbono y la presencia de oxígeno en su estructura molecular, la combustión requiere menos aire, lo que reduce el flujo másico de los productos y favorece una mayor proporción relativa de vapor de agua. La fracción másica de H_2O supera a la de CO_2 a partir del 65% de hidrógeno en la mezcla. Además, el etanol demuestra una buena capacidad de descarbonización: con solo 25% de H_2 se logra una reducción de CO_2 del 5%, alcanzando más del 30% de disminución al 75% de mezcla, superando el rendimiento del GLP y del octano en este aspecto.

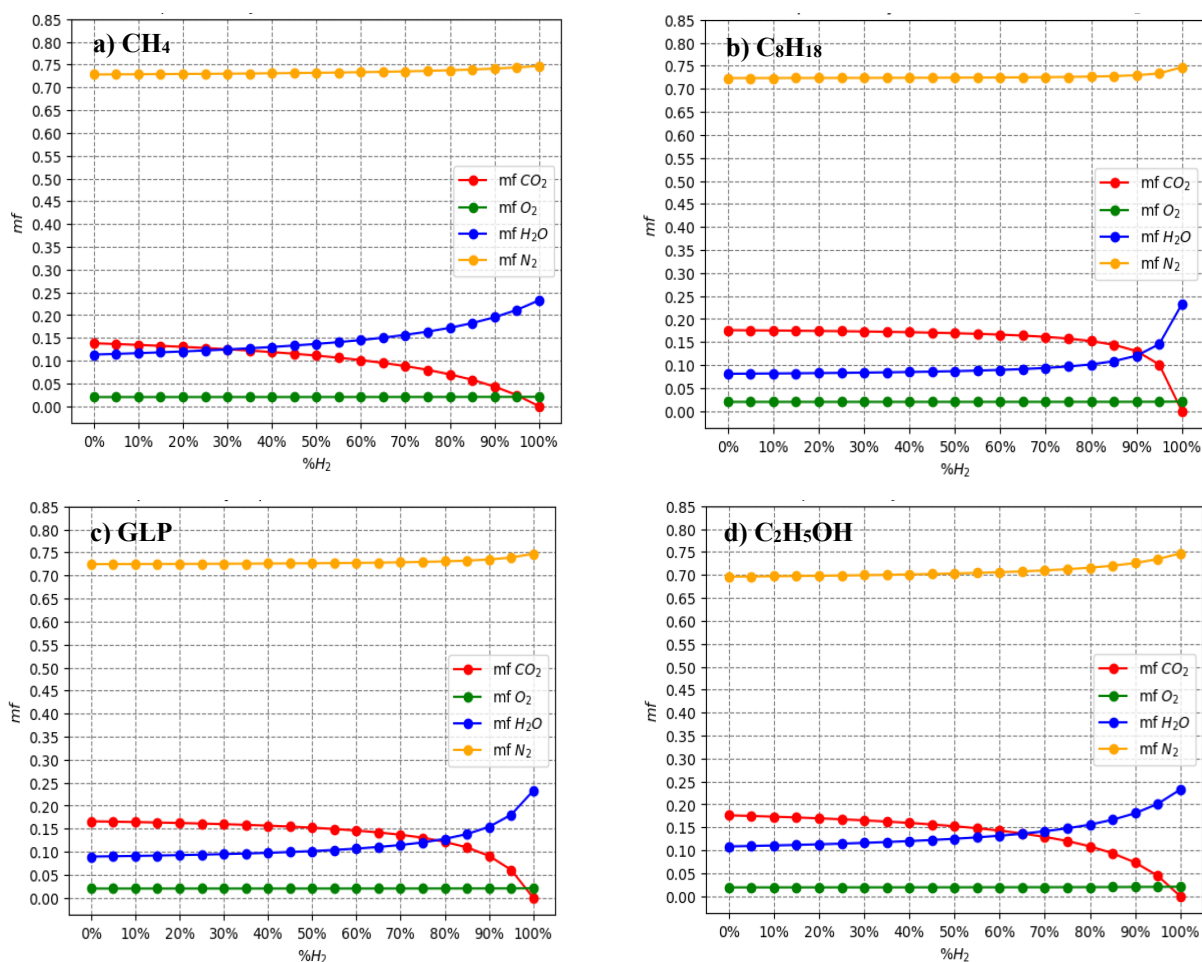


Figura 2: Fracciones másicas de los productos de combustión de mezclas con hidrogeno de: a) Metano, b) n-Octano, c) GLP, d) Etanol.

3.2. Emisiones de CO₂

La Figura 3a muestra la evolución de las emisiones de dióxido de carbono en función de la fracción másica de hidrógeno en la mezcla combustible, desde la combustión pura del hidrocarburo hasta la combustión exclusiva de H₂. Se observa que el proceso de descarbonización es más eficiente en mezclas con hidrocarburos de menor contenido de carbono, como el metano, mientras que es menos pronunciado en hidrocarburos más pesados, como el octano. Este comportamiento responde directamente a la cantidad de átomos de carbono presentes en la molécula base: a mayor contenido de carbono, mayor es la resistencia a la reducción de emisiones conforme se incorpora hidrógeno. En el caso del etanol, la presencia de un átomo de oxígeno en su estructura no influye significativamente en la formación de CO₂. El análisis se presenta en términos de fracciones másicas de CO₂ para facilitar una comparación general entre los diferentes combustibles y evidenciar la tendencia general del impacto del hidrógeno sobre las emisiones.

En la Figura 3b se presenta el flujo másico de dióxido de carbono generado durante la combustión de cada una de las mezclas analizadas. Los resultados muestran que el octano produce los mayores flujos de CO₂, seguido por el gas licuado de petróleo (GLP) y el metano, en concordancia con el número de átomos de carbono presentes en cada molécula. El etanol constituye un caso particular: debido a la presencia de un átomo de oxígeno en su estructura, requiere una menor cantidad de aire para la combustión completa. Esta reducción en el flujo de aire de entrada disminuye el flujo total de productos gaseosos, resultando en una menor masa de CO₂ emitido. Como consecuencia, la curva correspondiente al etanol se sitúa por debajo de las demás a lo largo de toda la gama de mezclas.

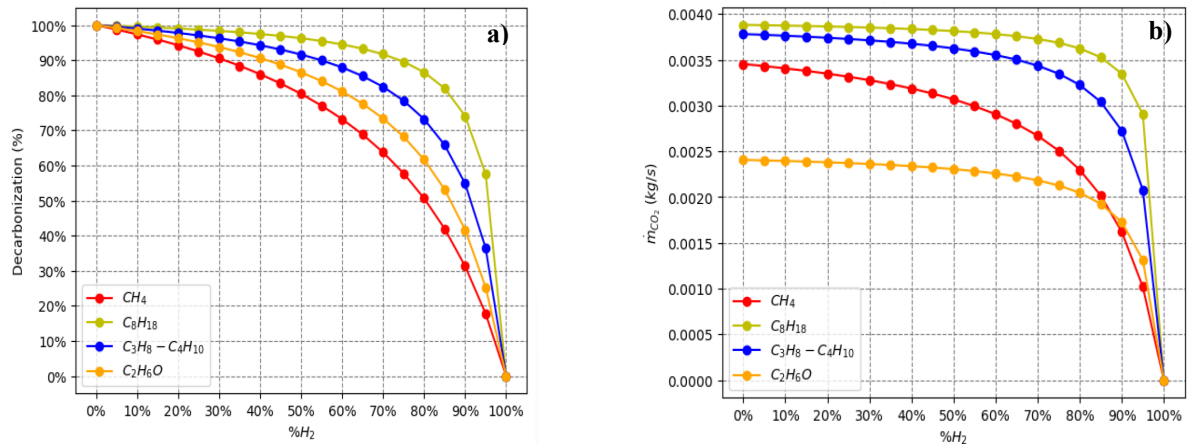


Figura 3: a) Porcentaje de descarbonización de los gases de combustión, b) Flujo másico de CO₂ en los gases de combustión.

3.3. Energía generada

La Figura 4 ilustra los valores de energía producida durante la combustión de diferentes hidrocarburos. Para los hidrocarburos puros (0%H₂), el metano se destaca como el gas que genera la mayor cantidad de energía. Posteriormente, se observa que el gas licuado de petróleo y el octano presentan valores de energía comparables, oscilando en un rango entre 50 y 60 kW. Con la incorporación de hidrógeno a la mezcla de combustible, la generación de energía cambia significativamente. Para el GLP y el octano, la adición de H₂ resulta en curvas de crecimiento exponencial. Este fenómeno se atribuye a las concentraciones de carbono inherentes a estos combustibles, lo que atenúa el efecto de la adición de H₂, una tendencia similar a la observada en la reducción de las emisiones de dióxido de carbono (CO₂). Por otro lado, el etanol (C₂H₅OH) exhibe un comportamiento energético diferente, presentando el valor más bajo de producción de energía entre todos los combustibles evaluados, ligeramente por encima de los 30 kW. Esta menor producción se correlaciona con su menor poder calorífico superior (PCS) en estado puro. Sin embargo, la adición de H₂ al etanol induce un crecimiento energético comparable al del metano. Además, es importante destacar que el valor energético del etanol solo supera al de otros gases, como el octano, cuando la concentración de hidrógeno en la mezcla alcanza un 95%.

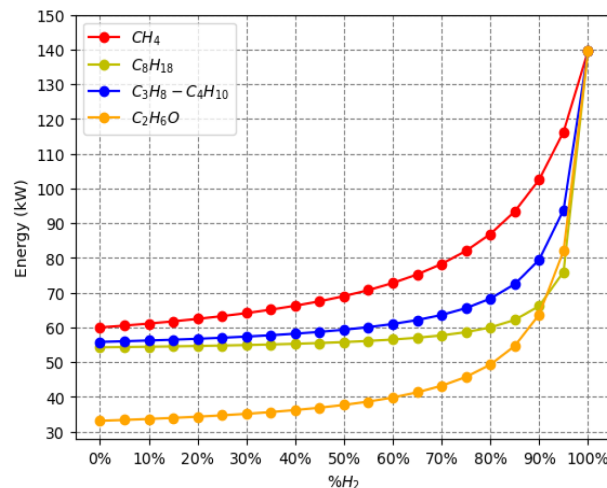


Figura 4: Energía generada por las mezclas de combustible en función del % de H₂.

La Figura 5a presenta los valores del poder calorífico superior (PCS) e inferior (PCI) para cada uno de los hidrocarburos analizados, en función de la fracción másica de hidrógeno en la mezcla. Como es esperable, en todos los casos las curvas de PCS se sitúan por encima de las correspondientes al PCI, en concordancia con sus definiciones termodinámicas. La tendencia observada es coherente con los resultados de la Figura 4, ya que tanto el PCS como el PCI representan, en esencia, la entalpía de combustión del combustible. Por lo tanto, al multiplicar estos valores por la masa del combustible introducido, se obtiene la energía generada, lo que explica la similitud en el comportamiento de ambas curvas respecto al análisis energético.

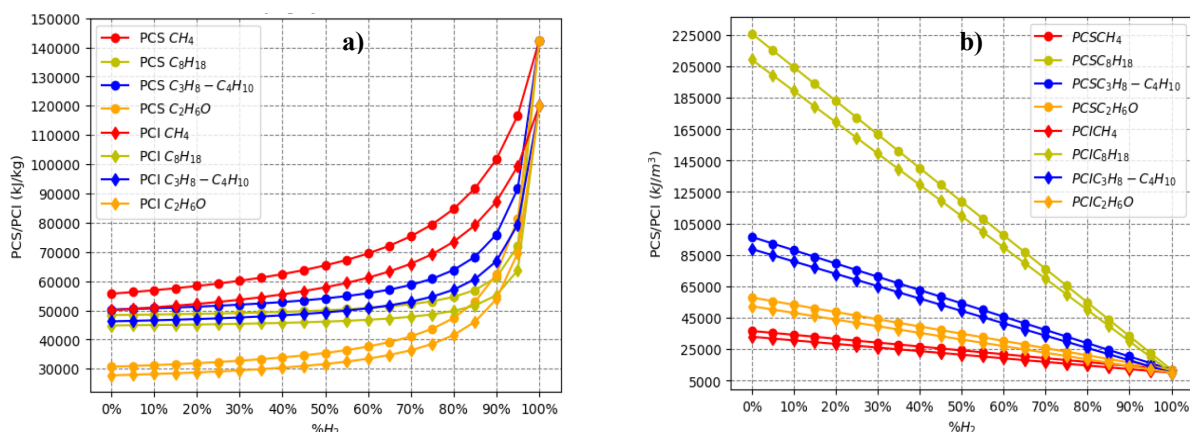


Figura 5: PCI/PCS para las mezclas de hidrocarburos, a) en base másica, b) en base volumétrica.

Adicionalmente, la Figura 5b muestra los mismos poderes caloríficos expresados en base volumétrica. En este caso, el comportamiento de las curvas cambia drásticamente: se observa una relación lineal decreciente en la que el hidrógeno presenta los valores más bajos debido a su baja densidad, mientras que los hidrocarburos más densos alcanzan mayores valores de PCS y PCI por unidad de volumen. Este contraste pone en evidencia la importancia de la base de referencia (masa o volumen) al evaluar el potencial energético de los combustibles alternativos.

En base volumétrica, los resultados muestran un cambio significativo en el orden de los poderes caloríficos con respecto a la base másica. El octano, que anteriormente presentaba el menor PCS entre los hidrocarburos tipo C_aH_b , alcanza en este caso el valor más alto: 225.796 kJ/m³. Le sigue el gas licuado de petróleo (GLP) con 96.365 kJ/m³, mientras que el etanol, que tenía el PCS más bajo en términos másicos, se posiciona en tercer lugar con 57.785 kJ/m³. Por último, el metano, que lideraba en la comparación másica, presenta el valor más bajo en base volumétrica, con apenas 36.509 kJ/m³. Este cambio en el orden relativo se explica principalmente por las diferencias en la densidad de los combustibles. Tal como se mostró en la etapa de pre-procesamiento, el octano presenta una densidad aproximadamente mil veces mayor que la del metano, lo que influye directamente en el valor volumétrico de su poder calorífico. De forma similar, el etanol, pese a su bajo contenido energético por unidad de masa, logra superar al metano en términos volumétricos debido a su mayor densidad.

3.4. Índice de Wobbe

En el caso del metano, el índice de Wobbe inicial es de 49.057 kJ/m³ (ver Figura 6a), lo que establece un margen de tolerancia de ± 2.698 kJ/m³ considerando los ± 5.5 % de variación de la mezcla que no puede ser superada, para evitar mayores cambios en la cámara de combustión. Los resultados indican que se pueden incorporar hasta un 20% de hidrógeno en la mezcla sin sobrepasar este umbral, alcanzando un índice de Wobbe de 46.677 kJ/m³, aún dentro del rango permitido. Este comportamiento sugiere una buena capacidad de adaptación del metano frente a la adición de hidrógeno verde, tanto desde el punto de vista energético como ambiental. A partir de una concentración de H_2 del 30%, el vapor de agua generado en la combustión supera en proporción al CO_2 , lo que señala un proceso de descarbonización progresiva, aunque moderada: a dicha concentración, la reducción de CO_2 es del orden del 10% en términos de fracción másica. Además, el metano mantiene un elevado poder calorífico superior (PCS) másico, lo que permite sostener una alta producción energética en las condiciones simuladas.

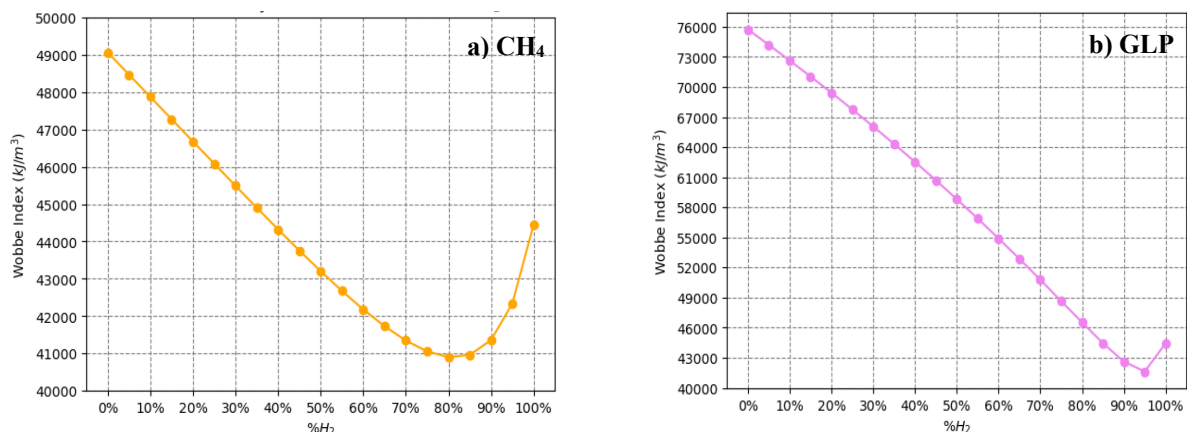


Figura 6: Índice Wobbe para el: a) Metano, b) GLP.

En el caso del gas licuado de petróleo (GLP), el índice de Wobbe inicial es de 75.730 kJ/m³ (ver Figura 6b), y su margen de variación permitido es de ± 4.165 kJ/m³. Bajo este criterio, la mezcla se mantiene dentro del rango admisible hasta una proporción máxima de 10% de hidrógeno, donde se obtiene un índice de 72.643 kJ/m³. A partir del 15%, el índice cae a 71.052 kJ/m³, ligeramente por debajo del límite inferior (71.565 kJ/m³), lo que indica la necesidad de ajustar componentes del sistema si se pretende operar con mezclas superiores a dicho porcentaje.

Comparativamente, el metano ofrece una mayor tolerancia a la mezcla con hidrógeno desde el punto de vista del índice de Wobbe, permitiendo hasta el doble de porcentaje admisible (20% frente a 10%) sin comprometer la compatibilidad con la infraestructura existente. Esta característica, sumada a su menor contenido de carbono, refuerza su potencial como gas base para procesos de descarbonización gradual mediante la incorporación de hidrógeno verde.

4. CONCLUSIONES

La presente investigación permitió modelar y analizar de forma integral la combustión de mezclas de hidrógeno con distintos hidrocarburos mediante herramientas computacionales que integraron el cálculo de propiedades físico-químicas, la simulación termodinámica y el análisis detallado de los productos de combustión. Esta metodología facilitó la cuantificación de los efectos de la adición progresiva de hidrógeno sobre el rendimiento energético y las emisiones de gases de interés por su efecto invernadero, particularmente del dióxido de carbono.

Los resultados revelan que el metano es el hidrocarburo con mayor potencial de descarbonización al mezclarse con hidrógeno, alcanzando una reducción del 5,75% en emisiones de CO₂ con un 20% de hidrógeno, sin requerir modificaciones en los sistemas existentes gracias a que se mantiene dentro del límite impuesto por el índice de Wobbe. Por su parte, el gas licuado y el octano logran reducciones menores (1,1% y 0,2% respectivamente). El etanol, aunque requiere menos aire para combustionar, produce aproximadamente la mitad de la energía en comparación con los otros combustibles, lo que obliga a incrementar el flujo de combustible para igualar su aporte energético.

En síntesis, la evaluación de los hidrocarburos en combinación con hidrógeno verde demuestra que la selección del combustible más adecuado depende del criterio de análisis. Desde un enfoque ambiental, los hidrocarburos con menos átomos de carbono, como el metano, resultan más efectivos en la reducción de emisiones. Si el análisis se hace por unidad de masa, el metano es también el más eficiente energéticamente, mientras que el etanol es el menos favorable. En términos volumétricos, relevante en aplicaciones industriales, el octano muestra mejor desempeño, mientras que el metano pasa a ser menos eficiente.

A pesar de que no todos los hidrocarburos muestran el mismo nivel de descarbonización, cada uno tiene aplicaciones específicas en las que sus propiedades pueden ser aprovechadas de forma óptima. Esta comparación busca ofrecer una visión general del comportamiento de distintos hidrocarburos frente a la adición de hidrógeno y los posibles efectos en escenarios de transición energética.

Se concluye que la estrategia de blending con hidrógeno constituye una opción viable para reducir emisiones en procesos de combustión continua. Incluso reducciones modestas, cuando se aplican a gran escala y de forma sostenida, pueden tener un impacto ambiental significativo. Por ello, es esencial continuar con el desarrollo de tecnologías que permitan implementar estas soluciones de manera efectiva, económica y adaptable a distintas realidades energéticas, como la de Bolivia y Chile.

REFERENCIAS

- [1] M. Gallardo and R. Barra, “Cambio climático global,” Universidad de Centro de Concepción, 1997.
- [2] ACCIONA, “El hidrógeno verde: La energía del futuro clave en la descarbonización.” [Online]. Available: <https://www.accion.com/es/hidrogeno-verde>.
- [3] Z. Al-Hamamre and J. Yamin, “The effect of hydrogen addition on premixed laminar acetylene-hydrogen-air and ethanol-hydrogen-air flames,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 18, pp. 7499–7509, Jun. 2013, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.03.125.
- [4] M. K. G. Gheshlaghi and A. M. Tahsini, “Numerical investigation of hydrogen addition effects to a methane-fueled high-pressure combustion chamber,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 86, pp. 33732–33745, 2023, doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.05.119.
- [5] H. Ishaq and I. Dincer, “A comprehensive study on using new hydrogen-natural gas and ammonia-natural gas blends for better performance,” *J Nat Gas Sci Eng*, vol. 81, 2020, doi: 10.1016/j.jngse.2020.103362.
- [6] B. Breer et al., “Numerical investigation of NO_x production from premixed hydrogen/methane fuel blends,” *Combust Flame*, vol. 255, 2023, doi: 10.1016/j.combustflame.2023.112920.

- [7] G. Ali, T. Zhang, W. Wu, and Y. Zhou, "Effect of hydrogen addition on NO_x formation mechanism and pathways in MILD combustion of H₂-rich low calorific value fuels," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 15, pp. 9200–9210, 2020, doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.01.027.
- [8] M. N. Rahman, N. Shahril, S. Yusup, and I. Shariff, "Hydrogen Co-Firing Characteristics in a Single Swirl Burner: A Numerical Analysis," *IOP Conf Ser Mater Sci Eng*, vol. 1257, no. 1, p. 012020, Oct. 2022, doi: 10.1088/1757-899x/1257/1/012020.
- [9] K. Bayramoğlu, A. Bahlekeh and K. Masera, "Numerical investigation of the hydrogen, ammonia and methane fuel blends on the combustion emissions and performance," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 99, pp. 39586–39598, 2023, doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.06.079.
- [10] H. Rashid, Q. Zhu, M. Rauf, and A. Oppong, "Towards cleaner combustion of hydrocarbons by blending with ammonia and hydrogen using CFD-Based emissions minimization," *Results in Engineering*, vol. 27, 2025, doi: 10.1016/j.rineng.2025.105604.
- [11] B. Wang, C. Yang, H. Wang, D. Hu, B. Duan, and Y. Wang, "Study on Combustion and Emission Performance of Dual Injection Strategy for Ammonia/Hydrogen Dual-Fuel Engine," in *Journal of Physics: Conference Series*, 2023. doi: 10.1088/1742-6596/2437/1/012027.
- [12] G. Wobbe, "La definizione della qualità del gas," *L'industria del gas e degli acquedotti*, vol. XV, no. 11, pp. 165–172, Rome, Italy, 1926.
- [13] A. Cicchitti, C. Lombardi, and M. Silvestri, "Two-phase cooling experiments: pressure drop, heat transfer and burnout measurements," *Energ. Nucl.*, vol. 7, pp. 417–425, 1960, [Online]. Available: http://www.osti.gov/energycitations/product.biblio.jsp?osti_id=4181977.
- [14] Y. A. Cengel, and M. A. Boles, *Thermodynamics: An engineering approach*, 8va Edición. México, 2015.
- [15] H. Copete, A. Amell, and F. Cadavid, "Simulación numérica de una cámara de combustión de alta velocidad con dos configuraciones de inyección de combustible," *Dyna*, vol. 75, no. 156, pp. 109–120, 2008.
- [16] CoolProp Development Team, "CoolProp", version 6.6.0, 2024. [Online]. Available: <https://coolprop.org>.