

ANÁLISIS DE LAS CARACTERÍSTICAS DE ASPERSIÓN DE MEZCLAS BINARIAS DE BIODIÉSEL + ISÓMEROS DE OCTANOL

SPRAY CHARACTERISTICS ANALYSIS OF BIODIESEL+ OCTANOL ISOMERS BINARY MIXTURES

Vargas-Ibáñez L.T^{1,2}, Contreras-Vázquez E.¹, Cano-Gómez J.J^{1*}, López-Lázaro J.S³, Iglesias-Silva G.A.⁴

¹Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Nuevo León. San Nicolás de los Garza, Nuevo León, C.P: 66455, México

²G-SCOP-Laboratoire des Sciences pour la Conception, l'Optimisation et la Production, Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, Grenoble, C.P. 38000, Francia

³División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Cunduacán, Tabasco 86690, México

⁴Departamento de Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Celaya, Celaya, Guanajuato, C.P. 38010, México.

jose.canogmz@uanl.edu.mx*

RESUMEN

El objetivo de este trabajo es elucidar el efecto de las propiedades termofísicas de mezclas biodiésel + isómeros de octanol (1-octanol, 2-octanol y 2-etil-1-hexanol) sobre las características de aspersión durante el proceso de inyección en un motor diésel mediante Dinámica de Fluidos Computacional (DFC). La selección de las mezclas en estudio se realizó con base en el cumplimiento con los límites establecidos por la norma EN590 para el diésel convencional, tanto para densidad como viscosidad. Para 1-octanol, 2-octanol y 2-etil-1-hexanol, las mezclas que satisfacen la normativa son aquellas con fracción peso de alcohol entre (0.7-0.9), (0.6-0.9) y (0.8-0.9), respectivamente. Longitud de penetración (l) y ángulo de aspersión (θ) fueron determinadas para cada una de las mezclas en estudio. Para las tres mezclas de biodiésel se observó una reducción en la l y un aumento del θ respecto al biodiésel puro en un tiempo de inyección de 1 ms. Lo anterior debido al efecto de los alcoholes como aditivos del biodiésel, permitiendo una reducción en los valores de densidad, viscosidad y tensión

superficial, contribuyendo a características de aspersión similares al diésel.

Palabras clave: aditivos; alcoholes; biodiésel; características de aspersión.

ABSTRACT

The objective of this work is to elucidate the effect of the thermophysical properties of biodiesel mixtures + octanol isomers (1-octanol, 2-octanol and 2-ethyl-1-hexanol) on the spray characteristics during the injection process in a diesel engine using Computational Fluid Dynamics (DFC). The selection of the mixtures under study was made based on compliance with the limits established by the EN590 standard for conventional diesel, both for density and viscosity. For 1-octanol, 2-octanol and 2-ethyl-1-hexanol, the mixtures that satisfy the regulations are those with alcohol weight fraction between (0.7-0.9), (0.6-0.9) and (0.8-0.9), respectively. Penetration length (l) and spray angle (θ) were determined for each of the mixtures under study. For the three biodiesel mixtures, a

reduction in λ and an increase in θ compared to pure biodiesel were observed in an injection time of 1 ms. This is due to the effect of alcohols as additives to biodiesel, allowing a reduction in density, viscosity and surface tension values, contributing, to spray characteristics similar to diesel.

Keywords: additives; alcohols; biodiesel; spray characteristics

INTRODUCCIÓN

Alrededor del mundo, los motores de combustión interna son ampliamente utilizados para diversos fines, dichos motores funcionan a partir combustibles de origen fósil como el diésel, los cuales, al combustionar emiten gases de efecto invernadero (GEI) y contaminantes antropogénicos. En el año 2015 se estimó que, para México, el sector de transporte liberó a la atmosfera cerca del 26% de las emisiones de GEI totales [1]. El uso del biodiésel (B100) como alternativa al diésel ha cobrado relevancia debido a que se puede utilizar haciendo muy pocas o nulas modificaciones al motor diésel [2]; además de ser biodegradable, no tóxico y renovable, su combustión reduce las acumulaciones de monóxido de carbono (CO) entre otros gases de escape [3]. A pesar de sus ventajas, el uso de biodiésel podría causar un aumento en las emisiones de óxidos de nitrógeno (NOx) y una disminución en la eficiencia del motor, esto como consecuencia de los valores en las propiedades termofísicas que presenta el biodiésel (densidad, viscosidad y tensión superficial) las cuales tienen un efecto en las características de aspersion del combustible dentro de la cámara de combustión del motor [2].

Una propuesta para reducir estas diferencias entre las propiedades

termofísicas (densidad, viscosidad y tensión superficial) del diésel y el biodiésel es el uso de alcoholes como aditivos [4],[5]. Etanol y metanol han sido los alcoholes más estudiados, sin embargo, su poca miscibilidad a altas concentraciones, su bajo número de cetano y poder calorífico representa una desventaja para su uso como aditivos [5]. Por consiguiente, en los últimos años, los alcoholes de cadena larga, como el 1-octanol, han cobrado gran interés, debido a su alta miscibilidad con el diésel y el biodiésel, aunado a un alto número de cetano y poder calorífico, convirtiéndolo en una alternativa atractiva para su estudio y aplicación como aditivo del biodiésel [3],[6]. Así mismo, el uso de estos alcoholes en biodiésel mejora la densidad, viscosidad y tensión superficial de la mezcla biodiésel.

El objetivo de este trabajo es elucidar el efecto de las propiedades termofísicas (densidad, viscosidad y tensión superficial) de mezclas biodiésel + alcohol (1-octanol, 2-octanol y 2-etil-1-hexanol) sobre las características de aspersion durante el proceso de inyección en la cámara de combustión mediante Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) utilizando ANSYS Fluent 2021[®].

METODOLOGÍA

Las mezclas biodiésel + alcohol que cumplen con los límites establecidos por la norma EN590 para densidad y viscosidad, fueron utilizadas para el análisis de las características de aspersion.

Estas mezclas fueron caracterizadas por nuestro grupo de investigación [7].

Análisis DFC. La metodología que sigue el análisis DFC se describe mediante un proceso iterativo de 6 pasos, como se muestra en la **Figura 1**.

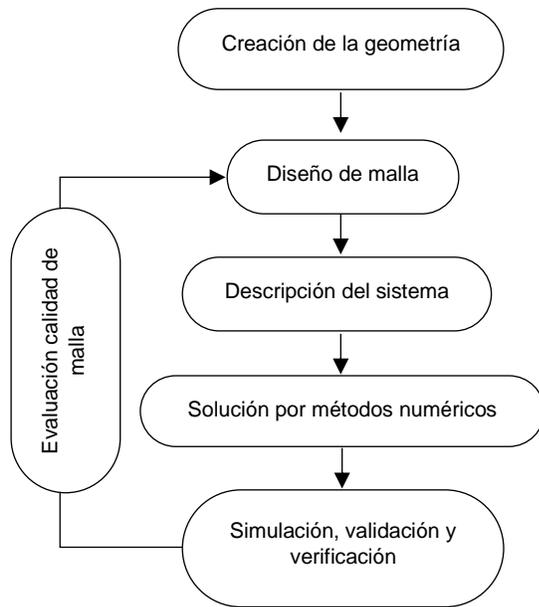


Figura 1. Metodología de DFC.

Creación de la geometría. La geometría utilizada representa una boquilla de inyección de un orificio dentro de la cámara de combustión de un motor diésel. El orificio de la boquilla de inyección tiene un diámetro de 0.2 mm y un largo de 10 m m. La **Figura 2a** muestra las dimensiones de la boquilla de inyección y su posición en la cámara de combustión.

La geometría fue creada utilizando el software Design Modeler®, como se muestra en la **Figura 2.b**.

Mallado. El dominio se ha discretizado mediante el software ANSYS Meshing®. Elementos tetragonales han sido seleccionados para la discretización de la geometría. Se realizó una prueba de malla para evaluar la independencia de los resultados respecto al proceso de discretización en términos del número de elementos y calidad de la malla.

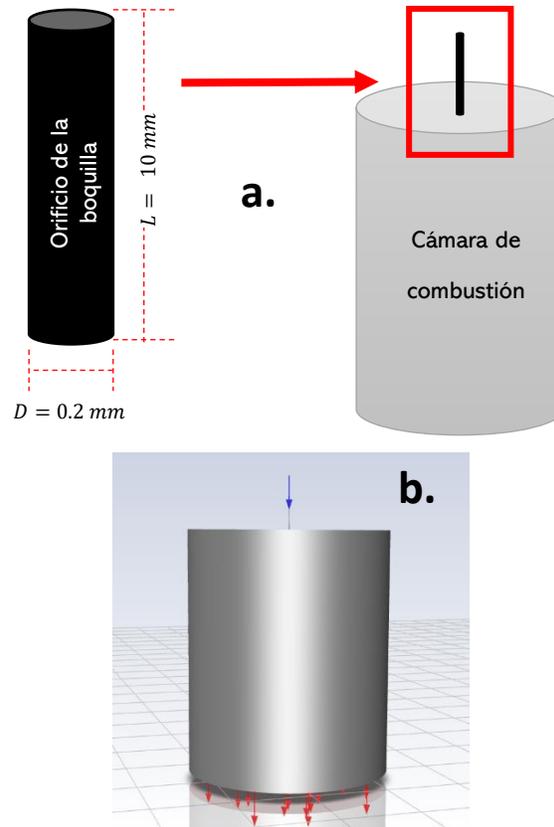


Figura 2. Creación de la geometría; (a) dimensiones de la boquilla; (b) representación de la geometría en Design Modeler®.

Se han probado 3 tipos de malla en el análisis de la longitud de penetración del diésel puro dentro de la cámara de combustión.

Los resultados obtenidos se han comparado con valores experimentales reportados por Shengao [8].

Simulación. Utilizando el software ANSYS Fluent® se simuló el proceso de inyección del combustible a través de la boquilla de inyección y la cámara de combustión. El fluido fue representado por un sistema multifásico a través de la metodología de Volumen de Fluido (VOF) [9], la cual se aproxima al modelo Euler-modelos Detached Eddy Simulation (DES) que resuelve un conjunto de ecuaciones de momentum y continuidad, rastreando la

fracción volumétrica de cada fluido a través del dominio computacional y el modelo RANS Spalart-Allmaras para resolver las fuerzas de viscosidad [9]. Para todas las simulaciones, se seleccionó el solucionador PISO para resolver las ecuaciones de momentum y la ecuación de continuidad del modelo VOF [9].

RESULTADOS

Calidad de la malla. La **Tabla 1** muestra las propiedades y características de cada una de las mallas que se evaluaron en la prueba de independencia.

Tabla 1. Propiedades de las mallas utilizadas para la discretización del dominio de estudio.

Malla	Número de elementos	Oblicuidad	Calidad Ortogonal
Malla 1	265,948	Min: 7.26e-0.005 Max: 0.8749 Promedio:0.2542	Min:0.1521 Max: 0.9936 Promedio:0.7442
Malla 2	433,903	Min:4.4247e-0.005 Max: 0.8491 Promedio: 0.2424	Min: 0.15095 Max: 0.9948 Promedio: 0.7563
Malla 3	528,119	Min: 1.509e-0.003 Max: 0.8370 Promedio: 0.2306	Min: 0.1631 Max: 0.9971 Promedio: 0.7877

A partir de los resultados de la prueba de malla, se construyó la **Figura 3** donde se muestra la comparación entre las longitudes de penetración obtenidas por las mallas y los resultados obtenidos por Shenago et al [8].

La malla 2 y malla 3 presentan una desviación porcentual de 2.33% y 3.45%, respectivamente, respecto a los valores reportados por Shengao et al [8]. Dada la similitud entre las mallas, se optó por utilizar la malla 2 para la simulación de las características de aspersion de las mezclas biodiésel + alcohol, ya que requiere un menor costo computacional.

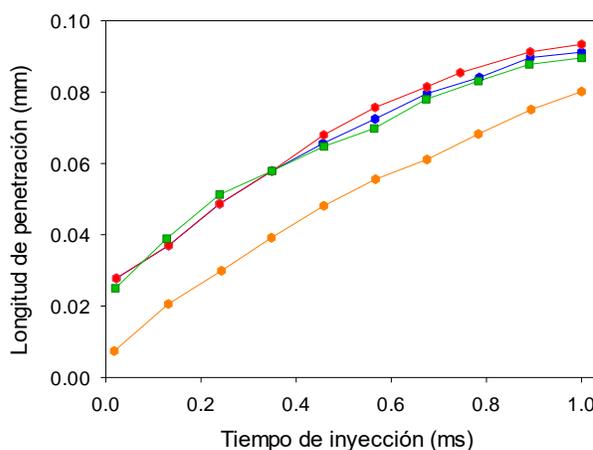


Figura 3. Longitud de penetración del diésel en función del tiempo de inyección utilizando distintas mallas; Shenago et al [8], ■; malla 1, ◆; malla 2, ●; malla 3, ●.

Tabla 2, muestra los valores de densidad, viscosidad y tensión superficial utilizados durante la simulación del proceso de inyección para cada mezcla biodiésel + alcohol, biodiésel y diésel puro.

Tabla 2. Propiedades de las mezclas biodiésel a 298.15 K y $P=0.1\text{MPa}$.^[7]

Combustible	Densidad ($\text{g}\cdot\text{cm}^3$)	Viscosidad Dinámica ($\text{mPa}\cdot\text{s}$)	Tensión superficial ($\text{mN}\cdot\text{m}^{-1}$)
Diésel (B0)	0.8249	2.55	24.34
Biodiésel (B100)	0.8689	6.37	30.10
70% (1O) + 30%(B100)	0.8351	5.50	28.12
80%(1O) + 20% (B100)	0.8306	5.76	27.76
90% (1O) + 10% (B100)	0.8262	6.23	27.22
60%(2O) + 40%(B100)	0.8366	4.58	27.40
70%(2O) + 30 % (B100)	0.8316	4.79	26.98
80%(2O) + 20%(B100)	0.8267	5.04	26.58
90%(2O) + 10%(B100)	0.8219	5.44	26.22
80%(2E1H) + 20%(B100)	0.8361	6.09	26.88
90%(2E1H) + 10%(B100)	0.8324	6.66	26.51

La **Figura 4** muestra los límites superiores e inferiores de viscosidad y densidad establecidos por la norma EN590. Las mezclas biodiésel que cumplen los límites de la norma son: (0.7-0.9), (0.6-9) y (0.8-0.9) en fracción masa de alcohol para las mezclas de biodiésel + 1-octanol (1O), biodiésel + 2-octanol (2O) y biodiésel + 2-etil-1-hexanol (2E1H), respectivamente. Dichas mezclas se seleccionaron para simular el proceso de inyección dentro de la cámara de combustión.

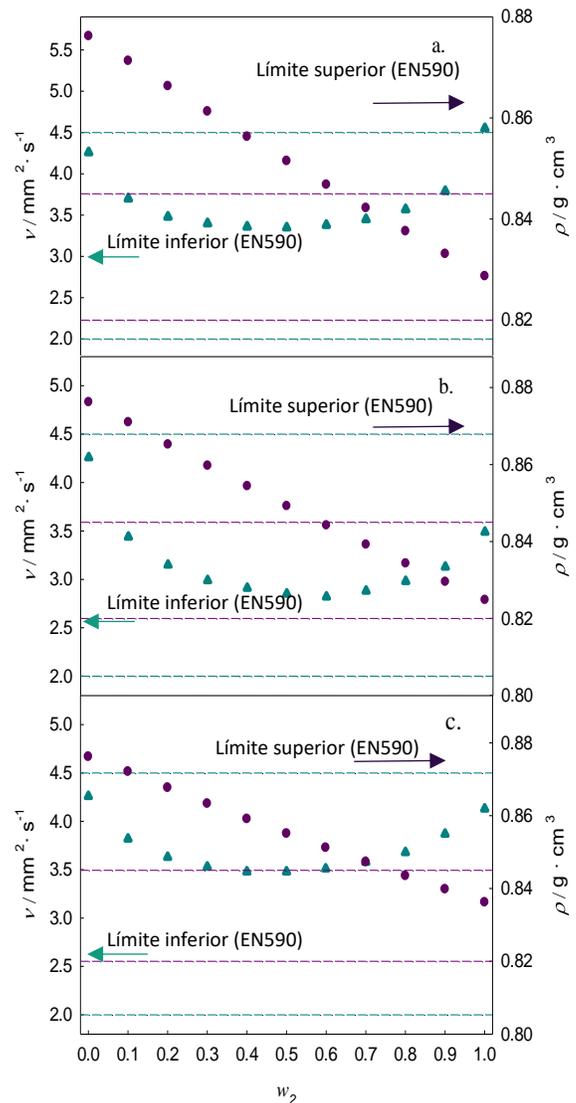


Figura 4. Comparación de la viscosidad cinemática, \blacktriangle , ν (exp) a 313.15 K y la densidad experimental, \bullet , ρ (exp) a 288.15 K de las mezclas: (a) biodiésel (1) + 1-octanol (2); (b) biodiésel (1) + 2-octanol; (c) biodiésel (1) + 2-etil-1-hexanol (2), con los límites establecidos por la norma EN590; ---, límites de viscosidad, y - - - , límites de densidad.

Características de aspersión. La Figura 5 muestra la comparación entre las longitudes de penetración alcanzadas por el diésel, biodiésel y las mezclas biodiésel + alcohol durante el proceso de inyección del combustible a un tiempo de 1 ms.

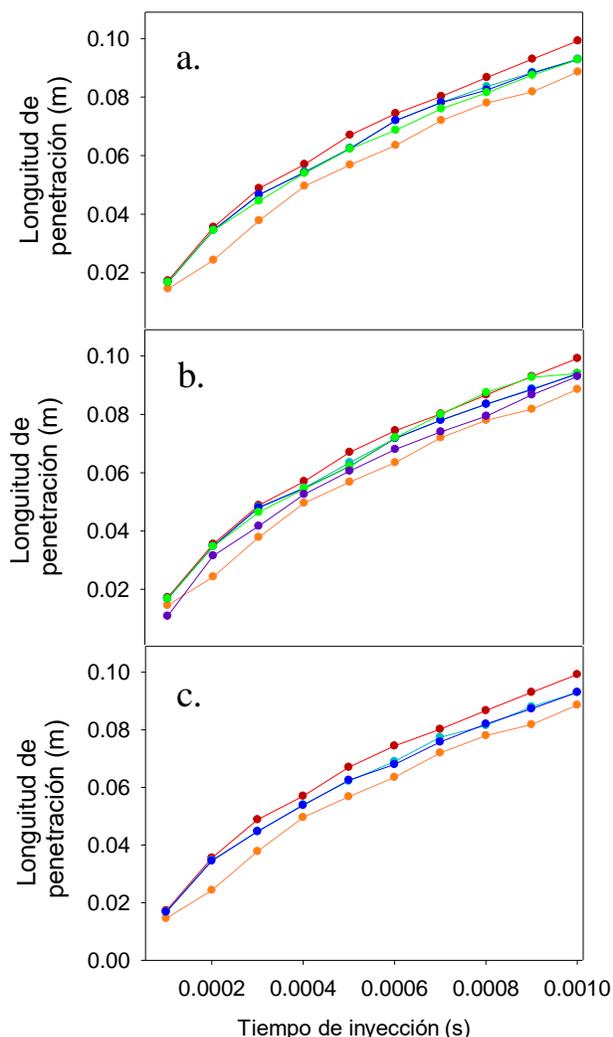


Figura 5. Longitud de penetración del diésel, biodiésel y mezclas biodiésel: (a) biodiésel (1) + 1-octanol (2); (b) biodiésel (1) + 2-octanol (2); (c) biodiésel (1) + 2-etil-1-hexanol (2): ●, diésel; ●, biodiésel; ●, 70%(1O) o 60%(2O) o 80%(2H1E) + 30% (B100) o 40% (B100) o 20% (B100); ●, 80%(1O) o 70%(2O) o 90%(2H1E) + 20% (B100) o 30% (B100) o 10% (B100); ●, 90%(1O) o 80%(2O) + 10% (B100) o 20% (B100); ●, 90%(2O) + 10% (B100).

La longitud de penetración alcanzada por el diésel y el biodiésel es de 0.089 m y 0.099 m, respectivamente, en un tiempo de inyección de 1 ms. La diferencia entre las longitudes de penetración que presenta el biodiésel y el diésel radica en los valores de viscosidad que presentan ambos combustibles. Una mayor viscosidad permite al fluido alcanzar mayores longitudes de penetración.

Para el caso de las mezclas biodiésel con los 3 alcoholes, estas presentan longitudes de penetración menores a la del biodiésel. Las mezclas biodiésel con 1-octanol, 2-octanol y 2-etil-1-hexanol muestran una desviación promedio de 0.0045, 0.0039 y 0.0044 m con respecto al valor final de longitud de penetración del biodiésel. Esta reducción en la longitud de penetración del combustible es resultado de una disminución en los valores de viscosidad y densidad de las mezclas biodiésel + alcoholes como aditivos. A mayor fracción masa de alcohol en la mezcla, la longitud de penetración del combustible disminuye y se asemeja más al comportamiento del diésel. La diferencia promedio entre la longitud de penetración de las mezclas 90% (1O) + 10% (B100), 90% (2O) + 10% (B100) y 90% (2E1H) + 10% (B100) y el diésel convencional, es aproximadamente 0.0052 m, 0.0039 m y 0.0051 m, respectivamente, siendo estas mezclas las que más se asemejan al comportamiento presentado por el diésel convencional. Por otro lado, las mezclas biodiésel con menor porcentaje de alcohol presentan longitudes de penetración cercanas al biodiésel, debido a un menor efecto de los aditivos en la reducción de viscosidad y densidad de las mezclas biodiésel.

La **Figura 6** muestra la comparación entre los ángulos de aspersión del diésel, biodiésel y las mezclas biodiésel estudiadas en un periodo de inyección de 1 ms.

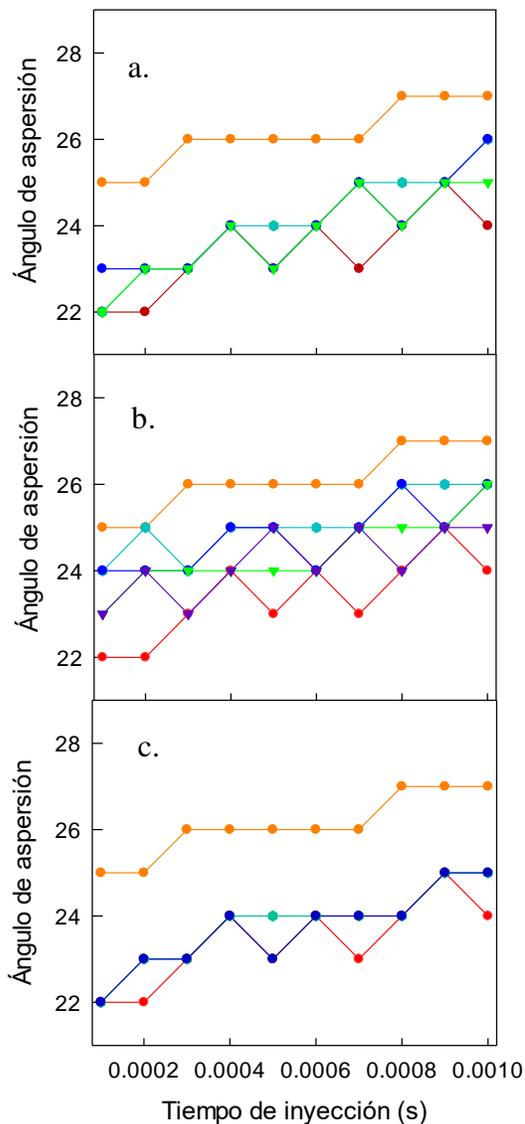


Figura 6. Ángulos de aspersión del diésel, biodiésel y mezclas biodiésel: (a) biodiésel (1) + 1-octanol (2); (b) biodiésel (1) + 2-octanol (2); (c) biodiésel (1) + 2-etil-1-hexanol (2): ●, diésel; ●, biodiésel; ●, 70%(1O) o 60%(2O) o 80%(2H1E) + 30% (B100) o 40% (B100) o 20% (B100); ●, 80%(1O) o 70%(2O) o 90%(2H1E) + 20% (B100) o 30% (B100) o 10% (B100); ●, 90%(1O) o 80%(2O) + 10% (B100) o 20% (B100); ●, 90%(2O) + 10% (B100).

El biodiésel presenta ángulos de aspersión menores al diésel debido a los valores altos de viscosidad y tensión superficial que presenta (ver **Tabla 2**), dificultando la dispersión del combustible en la cámara de combustión. Esta condición se atribuye a mayores fuerzas de cohesión entre las moléculas.

Para el caso del biodiésel, este presenta ángulos de aspersión entre los 22° y 25°, mientras que el diésel muestra valores entre los 25° y 27°. Las mezclas con 1-octanol y 2-etil-1-hexanol presentan ángulos de aspersión semejantes al biodiésel mientras que las mezclas con 2-octanol tienen un comportamiento más cercano al diésel. La atomización del combustible se asocia principalmente a la tensión superficial, sin embargo, el valor en la viscosidad de la mezcla desempeña un papel secundario durante este proceso, siendo así que, a mayor viscosidad, la atomización del combustible se reduce. Los ángulos de aspersión presentados por las mezclas con 1-octanol y 2-etil-1-hexanol rondan entre los 22° y 24° con respecto a la salida de la boquilla de inyección.

Por su parte, las mezclas biodiésel + 2-octanol, presentan ángulos de atomización entre los 23° y 26° más cercanos al diésel. Esta diferencia se debe a que el efecto del 2-octanol sobre la viscosidad y tensión superficial del biodiésel es mayor que la presentada por el 1-octanol y 2-etil-1-hexanol, esto es, reduce en mayor medida el valor de ambas propiedades, como se muestra en la **Tabla 2**.

CONCLUSIÓN.

El uso de isómeros de octanol como aditivos del biodiésel representa una alternativa para mejorar las propiedades

fisicoquímicas y las características de aspersion de las mezclas biodiésel.

Las mezclas biodiésel + isómeros de octanol mostraron una reducción en la longitud de penetración respecto al biodiésel puro a un tiempo de inyección de 1 ms. Para las mezclas biodiésel con 1 octanol, 2-octanol y 2-etil-1-hexanol se tiene una desviación promedio de 0.0045, 0.0039 y 0.0044 m con respecto al valor final de longitud de penetración del biodiésel. Las mezclas biodiésel con fracciones masa de 90% (1O) + 10% (B100), 90% (2O) + 10% (B100) y 90% (2E1H) + 10% (B100) presentan una longitud de penetración semejante al diésel convencional. Esta condición se atribuye a una disminución de las fuerzas de cohesión entre las moléculas, disminuyendo la longitud de penetración.

Por otro lado, ángulos de aspersion del biodiésel y diésel se presentan entre 22° a 25° y 25° a 27°, respectivamente. Biodiésel presenta ángulos de aspersion menores al diésel debido a los valores altos de viscosidad y tensión superficial que presenta (**Tabla 2**), dificultando la dispersion del combustible en la cámara de combustion.

Para las mezclas de biodiésel + 1-octanol y + 2-etil-1-hexanol se observaron ángulos de aspersion que oscilan entre los 22° y 24°, teniendo una aspersion semejante al biodiésel, mientras que las mezclas biodiésel + 2-octanol presentan ángulos de aspersion entre 23° y 26°, semejantes al diésel. Esta condición se atribuye a los valores inferiores en tensión superficial y viscosidad que presentan estas mezclas comparadas con las mezclas biodiésel con 1-octanol y 2-etil-1-hexanol a tiempo de inyección de 1 ms.

REFERENCIAS

- [1] INECC (2018). Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero. Recuperado de: <https://bit.ly/3jk2SHB>. Fecha de consulta 29 de Septiembre de 2021.
- [2] Gülüm M., Bilgin A. (2018). A comprehensive study on measurement and prediction of viscosity of biodiesel-diesel-alcohol ternary blends, *Energy*, vol. 148, no. February, pp. 341–361.
- [3] Cano-Gómez J.J., Iglesias-Silva G.A., Rivas-García P., Díaz-Ovalle C.O., Cerino-Córdova F. de J. (2017). Densities and viscosities for binary liquid mixtures of biodiesel + 1-butanol, + isobutyl alcohol, or + 2-butanol from 293.15 to 333.15 K at 0.1 MPa, *J. Chem. Eng. Data*, vol. 62, no. 10, pp. 3391–3400.
- [4] Liu H., Huo M., Yao M. (2011). Comparison of Ethanol and Butanol as Additives in Soybean Biodiesel Using a Constant Volume Combustion Chamber, *Energy & Fuels*, vol. 25, pp. 1837–1846.
- [5] Barabás I., Todoru I. A. (2011). Biodiesel Quality, Standards and Properties. *Biodiesel-Quality, Emissions and By-Products*. pp. 3-28. In Tech. Rijeka, Croatia.
- [6] Vargas-Ibáñez L.T., Cano-Gómez J.J., Santos-López I.A., Iglesias-Silva G.A., López-Lázaro J. de los S., Alcalá-Rodríguez M.M., Villareal-Mendoza C., Armendáriz-Ovalle Carolina (2021). Surface tensions of biodiesel blends with pentanol and octanol isomers at different conditions: measurement and new correlation, *Fluid Phase Equilibria*, vol. 540, article 113046.
- [7] Vargas-Ibáñez L.T (2021). ANALYSIS OF SPRAY CHARACTERISTICS

AND ENVIRONMENTAL IMPACT OF DIESEL + BIODIESEL+ LONG-CHAIN ALCOHOLS BLENDS. [Tesis de doctorado, Universidad Autónoma de Nuevo León, Université Grenoble Alpes].

- [8] Yu S., Yin B., Jia H., Wen S., Li X., Yu J. (2017). Theoretical and experimental comparison of internal flow and spray characteristics between diesel and biodiesel, *Fuel*, vol. 208, pp 20-29.
- [9] Ansys I. (2009). *Knowl. Creat. Diffus. Util. ANSYS FLUENT theory guide*, pp. 724–746.

